

**Master en Industria e  
Investigación Química**  
**ESPECIALIDAD QUÍMICA SINTÉTICA**  
**SINTESIS ESTEREOSELECTIVA**

---

**Guía Docente**

# Guía Docente.

## *1. Datos descriptivos de la materia.*

**Carácter:** Formación básica

**Convocatoria:** 1<sup>er</sup> cuatrimestre

**Créditos:** 3 ECTS

### **Profesorado:**

#### **Angel Rodríguez de Lera**

Catedrático del Departamento de Química Orgánica, Universidade de Vigo

#### **Rosana Alvarez Rodríguez**

Catedrática del Departamento de Química Orgánica, Universidade de Vigo

#### **F. Javier Sardina López**

Catedrático del Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela

#### **José Pérez Sestelo**

Titular del Departamento de Química Orgánica, Universidade de A Coruña

**Idioma en que es impartida:** Inglés y castellano. Para los profesores de la Universidad de Vigo, la docencia en inglés requerirá que los docentes superen la prueba de acreditación HELA (Higher Education Lecturing Accreditation).

## ***2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.***

### **2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.**

Especialidad 2: Química Sintética. Se relaciona fundamentalmente con las asignaturas de dicha especialidad.

### **2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.**

Esta asignatura aborda el estudio de la creación de (nuevos) estereocentros a partir de sustratos que contienen estereocentros o unidades proestereogénicas (enlaces múltiples C=C o C=X). Por ello, incorpora conceptos fundamentales para la formación en síntesis, tales como el análisis de la Estereoquímica en reacciones químicas, el análisis conformacional de los compuestos orgánicos y los modelos de reactividad, incluyendo la diastereoselectividad inducida por el sustrato, por el auxiliar quiral o por un aditivo (catalizador, ligando) quiral no racémico.

### **2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.**

Es obligatorio haber cursado con anterioridad las asignaturas de Profundización en Química Orgánica y Determinación Estructural Avanzada. Sería conveniente que esta materia se impartiese tras las de la Especialidad de Estructura y Reactividad Química, y estuviese en la programación docente a continuación de la materia de la Especialidad de Química Sintética denominada Compuestos Organometálicos en Síntesis y Catálisis.

## ***3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.***

### **3.1. Objetivos del aprendizaje.**

- Utilizar la terminología de la reactividad química, y la descripción apropiada de las reacciones estereoselectivas.
- Capacidad para manejar y comunicar, tanto por escrito, como de forma oral, los conceptos básicos de estereoquímica dinámica en Química Orgánica.
- Familiarizarse con la representación tridimensional de las moléculas, valorando adecuadamente las conformaciones accesibles a las mismas.
- Capacidad para visualizar estructuras moleculares mediante el manejo de modelos generados por cálculos mecanocuánticos.
- Entender la relación entre la estructura tridimensional de los compuestos orgánicos y su reactividad.
- Comprender las propiedades estructurales y la reactividad de los centros proestereogénicos en los procesos en los que se generan elementos estereogénicos.
- Explicar de modo racional el resultado de una reacción química en lo referente a la Estereoquímica del proceso.
- Conocer los principales tipos de reacciones de creación de centros estereogénicos, entendiendo sus mecanismos.

- Entender los efectos estereoelectrónicos que operan en la reactividad química.
- Valorar la importancia del análisis de estructuras de transición de las reacciones químicas, y visualizar las mismas obtenidas por cálculos mecanocuánticos.
- Entender cómo la quiralidad de compuestos naturales enantiopuros puede transmitirse a otros productos quirales no racémicos a través de transformaciones químicas.
- Comprender a cuantificar las proporciones relativas de diastereoisómeros y enantiómeros empleando métodos químicos y físicos.
- Predecir el resultado de una reacción química en la que se generan nuevos estereocentros.
- Resolver secuencias sintéticas para la obtención de moléculas quirales no racémicas.
- Adquirir y utilizar información bibliográfica referida a los procesos sintéticos en los que se generan estereocentros.

### 3.2. Competencias generales.

CG2. Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.

CG5. Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.

CG6. Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.

CB6. Poseer y comprender conocimientos que aporten una base y oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7. Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares)

CB8. Que los estudiantes sean capaces integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

### 3.3. Competencias específicas.

CE1. Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la química.

CE2. Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas.

CE3. Aplicar los materiales y las biomoléculas en campos innovadores de la industria e ingeniería química.

CE7. Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la determinación estructural.

### 3.4. Competencias transversales.

- Capacidad para trabajar en grupo, tanto en la resolución como en la discusión de problemas.

## • 4. Contenidos del curso.

### 4.1. Epígrafes del curso:

#### *Contenidos teóricos:*

**Tema 1.** Estereoquímica en reacciones químicas.

**Tema 2.** Análisis conformacional y reactividad química.

**Tema 3.** Adiciones a centros trigonales C=C.

**Tema 4.** Adiciones a centros trigonales C=X.

**Tema 5.** Adiciones conjugadas a sistemas C=C-C=X.

**Tema 6.** Adiciones a centros trigonales a sistemas C=C-X.

**Tema 7.** Reacciones entre centros trigonales.

### 4.2. Bibliografía recomendada

#### 4.2.1. Básica (manual de referencia).

*"Asymmetric Synthesis of Natural Products"* 2<sup>nd</sup> ed. Koskinen, A. M. P.; Wiley, New York: 2012.

*"Basic Principles of Asymmetric Synthesis "* Mulzer, J.; In *Catalytic Asymmetric Synthesis*, Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. Springer, Heidelberg: 1999; Vol I, chapter 3, pp. 33-100.

#### 4.2.2. Complementaria.

*"Stereoselective Synthesis"*. Atkinson, R. S. John Wiley & Sons: Chichester, UK, 1995.

*"Asymmetric Synthesis"*, Procter, G. Oxford University Press, Oxford: 1996.

*"Asymmetric Synthetic Methodology"*, Ager, D. J.; East, M. B. CRC Press, Boca Raton, FL, 1996.

*"Enantioselective Chemical Synthesis. Methods, Logic and Practice"*. Corey, E. J.; Kürti, L. Direct Book Publishing: LLC, 2010.

## TEMA 1. Estereoquímica en reacciones químicas.

### 1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se analizará la Estereoquímica, la parte de la Química que tiene relación con la estructura de las moléculas y sus propiedades de ocupación espacial. Además de revisar los conceptos fundamentales de las propiedades tridimensionales de las moléculas, se abordará el concepto de topicidad y su aplicación en la descripción de los procesos de creación de nuevos estereocentros. Se definirán los términos de diastereo y enantioselectividad, y se presentarán los procesos generales de creación de nuevos estereocentros mediante el control del sustrato, de auxiliares quirales o de catalizadores quirales no racémicos. Finalmente, se abordarán procesos químicos en los que se observa la obtención preferente de un enantiómero por manipulación de los aspectos cinéticos de la reacción y de la intervención de catalizadores quirales no racémicos.

### 2. Epígrafes del tema.

Quiralidad. Unidades estereogénicas. Topicidad. Diastereoselectividad y enantioselectividad. El "reservorio quiral": auxiliares y ligandos quirales. Resolución cinética.

### 3. Bibliografía

*"Asymmetric Synthesis of Natural Products"* 2<sup>nd</sup> ed. Koskinen, A. M. P.; Wiley-New York: 2012. Chapter 2 "Chirality, Topology and Asymmetric Synthesis", pp. 55-108.

*"Asymmetric Synthesis"*, Procter, G. Oxford University Press, Oxford: 1996. Chapter 1, pp. 5-13.

*"Basic Principles of Asymmetric Synthesis"* Mulzer, J.; In *Catalytic Asymmetric Synthesis*, Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. Springer, Heidelberg: 1999; Vol I, chapter 3, pp. 33-100.

### 4. Actividades a desarrollar.

## TEMA 2. Análisis conformacional y reactividad química.

### 1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se revisará el análisis conformacional de compuestos acíclicos y cíclicos y sus efectos en la reactividad. Se hará un énfasis especial en la tensión alílica, dada su influencia sobre la creación de nuevos estereocentros en procesos de adición a olefinas y sistemas carbonílicos  $\alpha,\beta$ -insaturados. La tensión alílica será también tenida en cuenta en el análisis de la reactividad de sistemas cíclicos, y se analizará la influencia de la estructura del ciclo y el efecto de los sustituyentes sobre la diastereoselectividad del proceso. Finalmente, la consecuencia del principio de Curtin-Hammett en la reactividad será abordada con ejemplos relevantes.

### 2. Epígrafes del tema.

Control conformacional de la diastereoselectividad. Análisis conformacional. Tensión alílica. Efectos estereoelectrónicos. El principio de Curtin-Hammett.

### 3. Bibliografía

*"Asymmetric Synthesis of Natural Products"* 2<sup>nd</sup> ed. Koskinen, A. M. P.; Wiley-New York: 2012. Chapter 3 "Asymmetric Synthesis", pp. 55-108.

*"Stereochemistry of Organic Compounds"*, Eliel, E. L.; Wilen, S. H.; Mander, L. N.; Wiley: New York. Chapters 10 and 11, pp. 597-834.

### 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (**ENTREGABLE 1**). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

#### VISUALIZACION

Manejo de modelos mecánicos para la comprensión de los efectos conformacionales en la reactividad química.

Visualización de la variación de la energía con el ángulo dihedral en (*E*)- y (*Z*)-2-penteno para evaluar el efecto de la tensión alílica 1,3 en la energía del sistema.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a las adiciones de nucleófilos a ciclohexanonas y cicloheptanonas para entender el efecto torsional en la reactividad química.

### TEMA 3. Adiciones a centros trigonales C=C.

#### 1. Sentido del tema (Introducción)

Como extensión de las reacciones de funcionalización de olefinas conocidas por los alumnos, se abordarán los métodos sintéticos de mayor importancia para la generación de estereocentros en derivados quirales no racémicos. Las reacciones de epoxidación, aziridinación, dihidroxilación, aminohidroxilación e hidrogenación serán explicadas haciendo hincapié en los aspectos de la diastereo y la enantioselectividad. Se podrán aplicar los conocimientos adquiridos en el tema 2 sobre el efecto de la tensión alílica en las reacciones de funcionalización de olefinas acíclicas y cíclicas con estereocentros en posición alílica. La importancia de los efectos dirigentes de determinados grupos funcionales en el control de la diastereo y enantioselectividad permitirá hacer predicciones sobre el control del sustrato en la creación de nuevos estereocentros.

#### 2. Epígrafes del tema.

Adiciones a enlaces C=C. Epoxidaciones diastereoselectivas de olefinas acíclicas y cíclicas. Epoxidaciones enantioselectivas (Sharpless, Jacobsen, Shi). Aplicaciones sintéticas de epoxialcoholes. Dihidroxilaciones diastereoselectivas de olefinas acíclicas y cíclicas. Dihidroxilación enantioselectiva de Sharpless (SAD). Aminohidroxilación enantioselectiva de Sharpless (SAA). Hidrogenación diastereoselectiva de olefinas. Hidrogenación Enantioselectiva.

#### 3. Bibliografía

*"Asymmetric Synthesis of Natural Products"* 2<sup>nd</sup> ed. Koskinen, A. M. P.; Wiley-New York: 2012. Chapter 3 "Asymmetric Synthesis", pp. 55-108.

*"Asymmetric Synthesis"*, Procter, G. Oxford University Press, Oxford: 1996. Chapters 6 and 7, pp. 101-196.

*"Basic Principles of Asymmetric Synthesis "* Mulzer, J.; In *Catalytic Asymmetric Synthesis*, Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. Springer, Heidelberg: 1999; Vol I, chapter 3, pp. 33-100.

#### 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (**ENTREGABLE 2**). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

#### VISUALIZACION

Manejo de modelos mecánicos para la comprensión de los efectos conformacionales (tensión alílica 1,2 y 1,3) en la reactividad de olefinas.



Visualización de las estructuras de transición correspondientes a las adiciones de perácidos a olefinas: modelo simple y modelo de olefinas cíclicas con centros estereogénicos en posición  $\alpha$  (tensión alílica 1,2).

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a las adiciones de dioxiranos a olefinas quirales para consolidar la comprensión del efecto torsional en la reactividad química. Visualización de los efectos estereoelectrónicos en la adición enantioselectiva del reactivo de Shi a olefinas.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a la dihidroxilación de olefinas quirales para consolidar la comprensión del efecto torsional en la reactividad química.

## TEMA 4. Adiciones a centros trigonales C=X.

### 1. Sentido del tema (Introducción)

La adición de nucleófilos a grupos carbonilo e iminas (sales de iminio) para generar alcoholes y aminas quirales no racémicas puede estar sujeta al control del sustrato o del reactivo. En el primer caso, se evaluará el efecto que provocan los sustituyentes en posiciones alílicas y homoalílicas en la diastereoselectividad. En el caso de los sustituyentes en posición  $\alpha$ , se plantearán los modelos predictivos de la diastereoselectividad inducida (Cram, Felkin-Anh, Cram quelato y Cornforth). Para el efecto de los sustituyentes oxigenados en posición  $\beta$  se aplicarán los modelos de Evans y Reetz. En el caso del control por el reactivo, se abordarán procesos enantioselectivos catalíticos de adición de hidruros y compuestos organometálicos a grupos carbonilo e imino, entre ellos las reacciones de Mannich y relacionadas.

### 2. Epígrafes del tema.

Adición a enlaces C=X. Esterecontrol en las adiciones nucleófilas a grupos carbonilo en compuestos cíclicos y acíclicos. Modelos de inducción asimétrica 1,2 y 1,3. Adiciones enantioselectivas a cetonas. Adiciones nucleófilas a iminas y sulfonamidas.

### 3. Bibliografía

"*Asymmetric Synthesis of Natural Products*" 2<sup>nd</sup> ed. Koskinen, A. M. P.; Wiley-New York: 2012. Chapter 3 "Asymmetric Synthesis", pp. 55-108.

"*Asymmetric Synthesis*", Procter, G. Oxford University Press, Oxford: 1996. Chapter 3, pp. 14-40.

"*Basic Principles of Asymmetric Synthesis*" Mulzer, J.; In *Catalytic Asymmetric Synthesis*, Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. Springer, Heidelberg: 1999; Vol I, chapter 3, pp. 33-100.

### 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia (ENTREGABLE 3)*. En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

### VISUALIZACION

Manejo de modelos mecánicos para la comprensión de las conformaciones de compuestos carbonílicos con centros estereogénicos en posición  $\alpha$  en su reacción con nucleófilos: modelos de predicción de diastereoselectividad de Felkin-Anh, Felkin-Anh polar, Cornforth y Cram quelato.

Representación de la curva de energía potencial del 2-fluoropropanal para justificar la reactividad de compuestos carbonílicos con centros estereogénicos polares en posición  $\alpha$  en su reacción con nucleófilos.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a las adiciones de compuestos organometálicos a sulfonamidas quirales no racémicas.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a la adición de dimetilzinc a benzaldehído catalizada por (-)-DAIB.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a la reacción de Strecker organocatalizada.

## TEMA 5. Adiciones conjugadas en sistemas $C=C-C=X$ .

### 1. Sentido del tema (Introducción)

Las adiciones a sistemas carbonílicos  $\alpha,\beta$ -insaturados permiten generar estereocentros en posiciones  $\alpha$  y  $\beta$ . En el último caso, la presencia de un estereocentro vecino posibilita el análisis de los efectos estereoelectrónicos y su influencia en la selección de la cara diastereotópica del doble enlace. Por otra parte, si el atrapado del enolato se lleva a cabo con un electrófilo apropiado, se puede predecir la diastereoselectividad inducida por el sustituyente incorporado a la posición  $\beta$ , lo que tiene mayor validez en el caso de sistemas cíclicos. Finalmente, se discutirán ejemplos relevantes de adiciones conjugadas enantioselectivas catalíticas que permiten el control por el catalizador de la selección de la cara enantiotópica de la olefina.

### 2. Epígrafes del tema.

Adición conjugada a sistemas  $C=C-C=O$ . Adiciones conjugadas diastereoselectivas. Adiciones conjugadas asimétricas catalíticas. Reducciones de sistemas conjugados. Epoxidación asimétrica de enonas.

### 3. Bibliografía

"*Asymmetric Synthesis of Natural Products*" 2<sup>nd</sup> ed. Koskinen, A. M. P.; Wiley-New York: 2012. Chapter 3 "Asymmetric Synthesis", pp. 55-108.

"*Asymmetric Synthesis*", Procter, G. Oxford University Press, Oxford: 1996. Chapter 6, pp. 101-147.

"*Basic Principles of Asymmetric Synthesis*" Mulzer, J.; In *Catalytic Asymmetric Synthesis*, Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. Springer, Heidelberg: 1999; Vol I, chapter 3, pp. 33-100.

### 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (**ENTREGABLE 4**). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

#### VISUALIZACION

Manejo de modelos mecánicos para la comprensión de las conformaciones *s-cis* y *s-trans* de los compuestos carbonílicos  $\alpha,\beta$ -insaturados.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a las adiciones organocatalizadas a compuestos carbonílicos  $\alpha,\beta$ -insaturados.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a las adiciones de Michael a iminas quirales y efecto de la transmisión conformacional de la quiralidad.

## TEMA 6. Adiciones a centros trigonales $C=C-X$ .

## 1. Sentido del tema (Introducción)

El atrapado de aniones enolato en el átomo de C del doble enlace proestereogénico permite la creación de estereocentros en posición  $\alpha$  al grupo carbonilo. En ocasiones, la geometría *E* o *Z* del enolato determina la diastereoselectividad, por lo que un aspecto importante del tema es la descripción de los procedimientos sintéticos que proporcionan de forma selectiva un isómero geométrico del enolato. Este conocimiento es fundamental para el estudio del tema 7. El atrapado del enolato bajo el control del sustrato, sobre todo en compuestos cíclicos, o del auxiliar en compuestos acíclicos, permite la creación de nuevos enlaces C-C o C-X. Los análogos nitrogenados de los enolatos (enaminas, hidrazonas, azaenolatos...) son equivalentes sintéticos empleados en la funcionalización de aldehídos.

## 2. Epígrafes del tema.

Adición a enlaces C=C-OM. Preparación regio y estereoselectiva de enolatos. Reacciones diastereoselectivas de enolatos quirales: alquilación, halogenación, aminación e hidroxilación. Reacciones diastereoselectivas de azaenolatos quirales.

## 3. Bibliografía

"*Asymmetric Synthesis of Natural Products*" 2<sup>nd</sup> ed. Koskinen, A. M. P.; Wiley-New York: 2012. Chapter 3 "Asymmetric Synthesis", pp. 55-108.

"*Asymmetric Synthesis*", Procter, G. Oxford University Press, Oxford: 1996. Chapter 4, pp. 41-69.

"*Basic Principles of Asymmetric Synthesis*" Mulzer, J.; In *Catalytic Asymmetric Synthesis*, Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. Springer, Heidelberg: 1999; Vol I, chapter 3, pp. 33-100.

## 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia (ENTREGABLE 5)*. En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

### VISUALIZACION

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a las formaciones de enolborinatos de cetonas en condiciones de enolización suaves.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a la desprotonación y alquilación de hidrazonas quirales derivadas de cetonas.

## TEMA 7. Reacciones entre centros trigonales.

### 1. Sentido del tema (Introducción)

El aspecto de mayor complejidad del programa es el control sobre la creación de dos (o más) estereocentros por reacción entre centros trigonales, ya sean olefinas, carbonilos o enolatos. Por ello, se tratará de sistematizar el resultado del proceso basándose en los principios generales de reactividad explicados a lo largo del curso, y se incidirá en la importancia del diseño para favorecer la participación de estados de transición cíclicos, ya que se puede predecir el resultado del proceso aplicando el modelo de Zimmerman-Traxler. Estos principios subyacen en las reacciones aldólicas de enolatos de boro con aldehídos, en las adiciones de organometálicos alílicos de boro a aldehídos, en las reacciones de Diels-Alder y en las transposiciones sigmatrópicas [3,3] y [2,3]. Por otra parte, en el caso de los derivados metálicos en los que la formación de quelatos está desfavorecida, incluso los estados de transición acíclicos permiten la predicción de la diastereoselectividad. El efecto de estereocentros en posición alílica en uno de los componentes

de la reacción de Diels-Alder (o en el aldehído para la reacción de Hetero Diels-Alder) y su influencia en la diastereoselectividad será también objeto de análisis en este tema.

## 2. Epígrafes del tema.

Reacciones entre centros trigonales: generación de dos o más estereocentros. Reacción aldólica: control de la diastereoselectividad. El modelo de Zimmerman-Traxler. Reacciones aldólicas organocatalizadas. La reacción de Mukaiyama aldólica de enolatos latentes. Diastereoselección doble: centros quirales en los componentes de la reacción aldólica. Adición de organometálicos alílicos a grupos carbonilo. Boranos alílicos. Estannanos y silanos alílicos: catálisis por ácidos y bases de Lewis quirales. Adición de organometálicos alílicos a iminas. Diastereoselectividad en las cicloadiciones de Diels-Alder.

## 3. Bibliografía

*"Asymmetric Synthesis of Natural Products"* 2<sup>nd</sup> ed. Koskinen, A. M. P.; Wiley-New York: 2012. Chapter 3 "Asymmetric Synthesis", pp. 55-108.

*"Asymmetric Synthesis"*, Procter, G. Oxford University Press, Oxford: 1996. Chapter 5, pp. 69-101.

*"Basic Principles of Asymmetric Synthesis"* Mulzer, J.; In *Catalytic Asymmetric Synthesis*, Jacobsen, E. N.; Pfaltz, A.; Yamamoto, Y. Springer, Heidelberg: 1999; Vol I, chapter 3, pp. 33-100.

## 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia (ENTREGABLE 6)*. En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

### VISUALIZACION

Manejo de modelos mecánicos para la comprensión de los modelos de estado de transición cíclico de Zimmerman-Traxler y de estado de transición abierto en la reacción entre centros trigonales.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a los modelos de Zimmerman-Traxler con un centro estereogénico en posición  $\alpha$ : Felkin-Anh polar y Cornforth.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a la reacción aldólica y la reacción de Mannich organocatalizadas.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a la reacción de alilboración con los ligandos de Brown y de Roush.

Visualización de las estructuras de transición correspondientes a la reacción de Diels-Alder enantioselectiva catalítica.

## 5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

### 5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas	12	Estudio autónomo individual o en grupo	24
Clases interactivas (Seminarios)	5	Resolución de ejercicios, u otros trabajos	20
Clases interactivas con ordenador	2	Resolución de ejercicios, prácticas de visualización con ordenador	4
Tutorías	2	Preparación de presentaciones orales, escritas, elaboración de ejercicios propuestos. Actividades en biblioteca o similar	10
<b>Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio</b>	<b>21</b>	<b>Total horas trabajo personal del alumno</b>	<b>58</b>

### 5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

A) *Clases expositivas* ("L" en las *tablas horarias*): Lección impartida por el profesor que puede tener formatos diferentes (teoría, problemas y/o ejemplos generales, directrices generales de la materia...). El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no necesitan manejarlos en clase. Habitualmente estas clases seguirán los contenidos del *Manual de referencia* elaborado por el profesor y propuesto en la *Guía Docente* de la asignatura. La asistencia a estas clases es obligatoria.

B) *Clases interactivas (Seminarios, "S" en las tablas horarias)*: Clase teórico/práctica en la que se proponen y resuelven aplicaciones de la teoría, problemas, ejercicios... El alumno participa activamente en estas clases de distintas formas: entrega de ejercicios al profesor (algunos de los propuestos en *problemas entregables* que el profesor entrega a los alumnos con la suficiente antelación); resolución de ejercicios en el aula, etc. El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no los manejarán en clase. Se incluyen las pruebas de evaluación si las hubiere. La asistencia a estas clases es obligatoria.

C) *Clases interactivas de visualización gráfica (Seminarios, "So" en las tablas horarias)*: Clase práctica en la que se visualizan estructuras de transición para las reacciones de mayor importancia en el curso. La asistencia a estas clases es obligatoria.

D) *Tutorías de pizarra en grupo muy reducido ("T" en las tablas horarias)*: Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por el Centro. En general, supondrán para cada alumno 2 horas por cuatrimestre y asignatura. Se proponen actividades como la supervisión de trabajos dirigidos, aclaración de dudas sobre teoría o las prácticas, problemas, ejercicios, lecturas u otras tareas propuestas; así como la presentación, exposición, debate o comentario de trabajos individuales o realizados en pequeños grupos. En muchos casos el profesor exigirá a los alumnos la entrega de ejercicios previa a la celebración de la tutoría. Estas entregas vendrán recogidas en el calendario de actividades que van a realizar los alumnos a lo largo del curso en la *Guía Docente*. La asistencia a estas clases es obligatoria.

### **5.3. Recomendaciones para el estudio de la materia**

- Es muy importante participar en las clases expositivas.
- Es fundamental el estudio intensivo de la materia dado que su impartición se concentrará en dos semanas.
- Una vez finalizada la lectura de un tema en el manual de referencia, es útil hacer un resumen de los puntos importantes.
- La resolución de problemas es clave para el aprendizaje de esta materia.
- Es imprescindible manejar los modelos mecánicos y visualizar las estructuras obtenidas por cálculos mecanocuánticos que se han seleccionado para este curso.

• 5.4. Calendario de actividades.

Diciembre 2014																														
	L	Ma	Mi	X	Vi																									
				4	5																									
16-18				L1	L2																									
	8	9	10	11	12																									
16-18	S1	L3	S2	L4	S3																									
	15	16	17	18	19																									
16-18	L5	S4	L6	S5	L7																									
Otras actividades				Notas																										
<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">Entrega de trabajos</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Tutorías</td> <td>Aula virtual</td> </tr> </tbody> </table> <table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">Exámenes</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>14 Enero</td> <td>Examen final ordinario 16:00 h Aula xx</td> </tr> <tr> <td>30 Junio</td> <td>Examen de recuperación 16:00 h Aulas xx</td> </tr> </tbody> </table> <table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">Horarios de tutoría y asistencia al alumnado</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>L, M, Mi, J</td> <td>10.00 a 11.00 h UVI, Despacho 2 Departamento de Química Orgánica</td> </tr> </tbody> </table>				Entrega de trabajos		Tutorías	Aula virtual	Exámenes		14 Enero	Examen final ordinario 16:00 h Aula xx	30 Junio	Examen de recuperación 16:00 h Aulas xx	Horarios de tutoría y asistencia al alumnado		L, M, Mi, J	10.00 a 11.00 h UVI, Despacho 2 Departamento de Química Orgánica	<table border="1"> <tbody> <tr> <td style="background-color: #90EE90;"></td> <td>Clases expositivas (teóricas) L1 (Tema 1), L2, ..., Ln</td> </tr> <tr> <td style="background-color: #ADD8E6;"></td> <td>Clases interactivas (Seminarios) S1 (Grupo 1°), S2, ..., Sn</td> </tr> <tr> <td style="background-color: #FFDAB9;"></td> <td>Clases interactivas (tutorías) T1 (Grupo 1°), T2, ..., Tn</td> </tr> <tr> <td style="background-color: #FFB6C1;"></td> <td>Clases prácticas de laboratorio P1 (Grupo 1°), P2, ..., Pn</td> </tr> <tr> <td style="background-color: #FFFF00;"></td> <td>Días no lectivos festivos</td> </tr> </tbody> </table> <p><b>Clases expositivas L1 a L7:</b> Aulas Virtuales (impartición en Universidade de Vigo)  <b>Seminarios:</b> UVI (aula 28); UDC (aula xx); USC (aula xx).  <b>Tutorías:</b> Para aulas consultar calendario.</p>				Clases expositivas (teóricas) L1 (Tema 1), L2, ..., Ln		Clases interactivas (Seminarios) S1 (Grupo 1°), S2, ..., Sn		Clases interactivas (tutorías) T1 (Grupo 1°), T2, ..., Tn		Clases prácticas de laboratorio P1 (Grupo 1°), P2, ..., Pn		Días no lectivos festivos
Entrega de trabajos																														
Tutorías	Aula virtual																													
Exámenes																														
14 Enero	Examen final ordinario 16:00 h Aula xx																													
30 Junio	Examen de recuperación 16:00 h Aulas xx																													
Horarios de tutoría y asistencia al alumnado																														
L, M, Mi, J	10.00 a 11.00 h UVI, Despacho 2 Departamento de Química Orgánica																													
	Clases expositivas (teóricas) L1 (Tema 1), L2, ..., Ln																													
	Clases interactivas (Seminarios) S1 (Grupo 1°), S2, ..., Sn																													
	Clases interactivas (tutorías) T1 (Grupo 1°), T2, ..., Tn																													
	Clases prácticas de laboratorio P1 (Grupo 1°), P2, ..., Pn																													
	Días no lectivos festivos																													

## **6. Indicaciones sobre la evaluación.**

### **6.1. Procedimiento de evaluación.**

La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final, estando condicionado el acceso al examen a la participación en al menos el 80% de las actividades docentes presenciales de asistencia obligatoria (seminarios y tutorías). En cualquier caso, será obligatorio asistir al menos a una de las dos tutorías programadas.

El profesor verificará la asistencia a las clases según el sistema de control de asistencias oficial de su centro. Las ausencias deberán ser justificadas documentalmente.

La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará de tres componentes: clases interactivas-seminarios (90%) y tutorías, 10%). Los seminarios y las tutorías incluirán ejercicios y trabajos realizados presencialmente y ejercicios entregados al profesor.

El examen final versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura (N2).

La calificación del alumno, que no será inferior a la del examen final ni a la obtenida ponderándola con la nota de la evaluación continua, se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente:

$$\text{Nota final} = \text{máximo} (0.4 \times N1 + 0.6 \times N2, N2)$$

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10).

Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.



## **6.2. Recomendaciones de cara a la evaluación.**

El alumno debe repasar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas utilizando el manual de referencia y los resúmenes. El grado de acierto en la resolución de los ejercicios propuestos proporciona una medida de la preparación del alumno para afrontar el examen final de la asignatura. Aquellos alumnos que encuentren dificultades importantes a la hora de trabajar las actividades propuestas deben acudir en las horas de tutoría del profesor, con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver dichas dificultades. Es muy importante a la hora de preparar el examen resolver los ejercicios entregados a lo largo del curso.

## **6.3. Recomendaciones de cara a la recuperación.**

El profesor analizará con aquellos alumnos que no superen con éxito el proceso de evaluación, y así lo deseen, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura. También les proporcionará material adicional (cuestiones, ejercicios, exámenes, etc.) para reforzar el aprendizaje de la materia.