VNIVERSITAT DE VALÈNCIA

Guía Docente
44712 Química bioorgánica y química supramolecular

FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44712
Nombre	Química bioorgánica y química supramolecular
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	3.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2226 - M.U. en Química Orgánica	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2226 - M.U. en Química Orgánica	8 - Química bioorgánica y química supramolecular	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgánica

RESUMEN

La asignatura Química bioorgánica y Química supramolecular trata de los, así llamados, “productos naturales”, esto es de las biomoléculas, los productos químico orgánicos que juegan un rol relevante en la química de la vida. Se estudian los metabolitos desde un punto de vista estructural, pero también desde una perspectiva sintética y, naturalmente, se analiza su origen biosintético, lo que permitirá adentrarnos en el catabolismo, el anabolismo de las biomoléculas y en los aspectos energéticos de la vida.

El estudio del catabolismo y de la transferencia de energía a nivel celular exige reconocer las fuentes de carbono empleados por las distintas células vivas y los modos que utilizan para transducir energía (células fototrofas que usan luz como fuente de energía y quimiotrofas que hacen uso de reacciones redox para obtener energía química).

La química orgánica que tiene lugar en los seres vivos es, en gran medida química enzimática, esto es, química orgánica catalizada por enzimas. En la presente asignatura se trata la química enzimática en una cierta extensión.[UP1]

Por otra parte, la química supramolecular puede definirse como la química más allá de la molécula y se basa en las interacciones no covalentes que se pueden establecer entre moléculas o especies cargadas. Por este motivo, se incluirá el estudio de los distintos tipos de interacciones que se pueden producir al igual que se discutirán conceptos muy utilizados en el área de la química supramolecular como son el reconocimiento molecular, la cooperatividad alostérica, el autoensamblaje o las librerías dinámicas. Igualmente se llevará a cabo un estudio de los distintos dispositivos que se pueden producir haciendo uso de estos conceptos así como sus posibles aplicaciones tanto en el campo de los materiales como en procesos biológicos

[UP1]Hablar con Alberto de esta parte

CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

Son imprescindibles para un buen seguimiento de las enseñanzas propias de la materia:
Conocimientos fundamentales de Química Orgánica

COMPETENCIAS

2226 - M.U. en Química Orgánica

- Que los/las 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) relacionados con su área de estudio.
- Que los/las estudiantes sean capaces de 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.
- Que los/las estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

- Utilizar las distintas técnicas de exposición -oral, escrita, presentaciones, paneles, etc- para comunicar sus conocimientos, propuestas y posiciones.
- Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.
- Saber participar en debates y discusiones, dirigirlos y coordinarlos y ser capaces de resumirlos y extraer de ellos las conclusiones más relevantes y aceptadas por la mayoría.
- Poseer habilidades sociales, un buen nivel de comunicación oral y escrita, así como capacidad para trabajar en equipo y con personas de diferentes procedencias.
- Competencias de gestión tales como la capacidad para la planificación y gestión de tiempo y recursos, así como para dirigir y tomar decisiones.
- Ser capaces de valorar la necesidad de completar su formación científica, en lenguas, en informática, asistiendo a conferencias o cursos y/o realizando actividades complementarias, autoevaluando la aportación que la realización de estas actividades supone para su formación integral.
- Conocer las rutas biosintéticas generales de los metabolitos secundarios y aplicar los conocimientos fundamentales de la reactividad orgánica a la comprensión de los mecanismos de las reacciones biosintéticas.
- Profundizar en el conocimiento de las propiedades fundamentales de las fuerzas intermoleculares y su importancia en química, biología y ciencia de materiales.
- Comprender la utilidad de la química supramolecular para la construcción de dispositivos moleculares y materiales moleculares nanoestructurados.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Por lo que se refiere a la **Química Bioorgánica**, los objetivos que se pretende conseguir se resumen en los siguientes puntos:

-Conocer las rutas biosintéticas generales de los metabolitos secundarios (acetato, shikimato,

mevalonato, compuestos nitrogenados).

-Aplicar los conocimientos fundamentales de la reactividad orgánica a la comprención de los

mecanismos de las reacciones biosintéticas.

-Aprender a identificar química y biológicamente los distintos grupos de metabolitos de acuerdo con su origen biogenético.

-Reconocer los usos y aplicaciones más importantes de los productos naturales con particular énfasis en la investigación de nuevos fármacos

-Estudio de productos naturales con estructura heterocíclica y su importancia en los procesos biológicos.[UP1]

Por lo que se refiere a la **Química Supramolecular**, los objetivos que se pretenden conseguir se pueden resumir en los siguientes puntos

-Conocer las propiedades fundamentales de las fuerzas intermoleculares y su importancia en química y biología.

-Saber aplicar los conceptos de la química supramolecular al diseño y síntesis de receptores

moleculares y dispositivos moleculares sencillos.

-Saber interpretar procesos químicos y bioquímicos cuyo funcionamiento se base en interacciones

intermoleculares.

-Identificar las fuerzas intermoleculares implicadas en la estabilización de estructuras multimoleculares así como distinguir su importancia relativa.

-Conocer los métodos experimentales utilizados en la caracterización de sistemas supramoleculares.

-Comprender la utilidad de la química supramolecular para la construcción de dispositivos moleculares y materiales moleculares nanoestructurados

- Diseñar, seleccionar y/o desarrollar productos y procesos químicos eficientes (ODS 7) y que minimicen su impacto sobre el medio ambiente (ODS 14 y 15), aprovechen materias primas alternativas y generen una menor cantidad de residuos (ODS 11).

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Vía del acetato: ácidos grasos y policétidos

Introducción. Metabolitos primarios y secundarios. Policétidos alifáticos. Lípidos y compuestos relacionados. Prostaglandinas, tromboxanos y leucotrienos. Macrólidos y poliéteres. Policétidos aromáticos.

2. Vía del sikimato: aminoácidos aromáticos y fenilpropanoides

Aminoácidos aromáticos y ácidos benzoicos sencillos. Ácidos cinámicos. Cumarinas. Metabolitos mixtos (shikimato + acetato): Flavonoides. Isoflavónidos

3. Vía del mevalonato: terpenos y esteroides

Origen biosintético de los compuestos terpenoides. Monoterpenos (C10). Sesquiterpenos (C15). Diterpenos (C20). Triterpenos (C30). Tetraterpenos (C40). Esteroides: colesterol

4. Alcaloides: derivados de los aminoácidos

Alcaloides derivados de la tirosina y de la fenilalanina. Alcaloides derivados del triptófano. Alcaloides derivados de la ornitina y de la lisina. Alcaloides derivados del ácido nicotínico.

5. Definición y desarrollo de la química supramolecular

Relación Receptor-Huésped. Preorganización y complementaridad. Selectividad cinética y termodinámica. Naturaleza de las interacciones supramoleculares. Diseño de receptores.

6. Reconocimiento de cationes

Éteres corona, éteres lazo y podandos. Criptandos. Esferandos. Calixarenos. Heterocoronas y criptandos mixtos. Selectividad en la complejación de cationes. Complejación de cationes orgánicos. Reconocimiento quiral

7. Reconocimiento de aniones

Conceptos básicos en el diseño de receptores para aniones. Receptores conteniendo aminas. Receptores derivados del guanidinio. Receptores organometálicos. Receptores neutros.

8. Reconocimiento de moléculas neutras

Ciclodextrinas y sus aplicaciones. Pinzas moleculares. Ciclofanos. Criptofanos. Cavidades covalentes: Carcenanos y hemicarcenanos. La química supramolecular de los fullerenos

9. Autoensamblaje

Autoensamblaje en sistemas sintéticos: consideraciones cinéticas y termodinámicas. Autoensamblaje en compuestos de coordinación. Autoensamblaje en redes metálicas. Autoensamblaje a través de enlaces de hidrógeno. Catenanos y rotaxanos. Helicatos. Nudos moleculares.

10. Extracción y transporte

Técnicas de extracción. Métodos de determinación de constantes de extracción. Aplicaciones. Desactivación de cationes. Activación de aniones: Catálisis de transferencia de fase. Técnicas para la evaluación de las constantes de complejación. Variables que afectan a las constantes de complejación. Transporte a través de membranas. Transporte mediado por transportadores. Procesos de transporte acoplados.

11. Dispositivos moleculares

Sistemas interruptores. Fotoquímica y electroquímica supramolecular. Información y señalización: sensores químicos. Máquinas moleculares basadas en rotaxanos y catenanos.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	15,00	100
Seminarios	15,00	100
TOTAL	**30,00**	

METODOLOGÍA DOCENTE

La asignatura está planteada para que el estudiante sea el protagonista de su propio aprendizaje y se estructura de la siguiente manera:

• Desde el principio de curso los estudiantes dispondrán de todo el material pedagógico correspondiente al curso.

• Clases magistrales (presenciales).- En estas clases se introducirán los conceptos básicos de la asignatura. Se fomentará la participación activa del alumno mediante el planteamiento de cuestiones relacionadas con la aplicación de conceptos y conocimientos previamente adquiridos por el alumno.

• Seminarios.- Esta actividad docente estará dedicada a la resolución de problemas y cuestiones con la participación activa del estudiante.

• Trabajos.- Adicionalmente, cuando el profesor lo considere oportuno, se propondrán trabajos de grupo pequeño. Será desarrollado por cada grupo y consistirá en el estudio y exposición oral de un caso práctico, relacionado con alguno de los temas del programa y descrito en una publicación científica. La duración máxima de la exposición será de 15 minutos, a los que le seguirá un máximo de 20 minutos de discusión

EVALUACIÓN

La evaluación de la asignatura se llevará a cabo de una forma continua por parte del profesor a lo largo del curso y constará de los siguientes apartados.

• **Evaluación directa del profesor**. Un 15% de la nota procederá de la evaluación directa del profesor en las clases teóricas y de problemas y en las tutorías. En esta evaluación se tendrán en cuenta distintos aspectos, entre los que cabe destacar:

- Asistencia y participación razonada y clara en las discusiones planteadas.

- Progreso en el uso del lenguaje propio de la química bioorgánica

- Resolución de problemas y planteamiento de dudas.

- Espíritu crítico.

- Entrega de ejercicios o trabajos.

● **Evaluación del trabajo realizado por el estudiante.** Se tendrá en cuenta tanto el contenido como la forma y, en su caso, la exposición y las respuestas a las preguntas formuladas por los demás estudiantes. A este apartado le corresponderá un 25% de la nota final.

● **Exámenes y pruebas escritas.** Un 60% de la nota se obtendrá a partir de los resultados de las pruebas escritas, que se realizarán en los periodos establecidos para ello.

- Exámenes de estilo tradicional tanto de cuestiones teóricas como de problemas, y de contenidos relacionados con la materia. Estas cuestiones y problemas serán de tal naturaleza que obliguen al estudiante a relacionar aspectos diferentes que aparezcan en distintos temas de la asignatura o también, si el profesor lo considera oportuno, en diferentes asignaturas de la materia.[UP1]

La calificación de la asignatura se obtendrá como media de las calificaciones emitidas por los profesores de Química Bioorgánica y Química Supramolecular

[UP1]Esto se refiere a la química supramolecular. Alberto no sé que pensará hacer.

REFERENCIAS

Básicas

- J. Mann, Secondary Metabolism, Clarendon Press, 1987, 2ª edición.
- P. M. Dewick, Medicinal Natural Products: A Biosynthetic Approach, Wiley 2002, 2ª edición; 2009, 3ª edición.
- K.B.G. Torssell, Natural Products Chemistry, J. Wiley & Sons, 1983.
- J. W. Steed, J. L. Atwood, Supramolecular Chemistry. John Wiley & Sons, 2009.
- P. J. Cragg, A Practical Guide to Supramolecular Chemistry, Wiley (Weinheim), 2005
- J.-M. Lehn, Supramolecular Chemistry. VCH (Weinheim), 1995

Complementarias

- D.L. Nelson y M.M. Cox, Lehninger Principles of Biochemistry, Worth Publishers, 2000, 3ª edición.
- M. Carda et al., Productos Naturales, Colección Material Docente, Publicaciones de la Universitat Jaume I, 1997.
- J. Mann et al., Natural Products. Their Chemistry and Biological Significance, Longman Scientific & Technical, 1994.
- K. E. Suckling, C. J. Suckling, Biological Chemistry. The Molecular Approach to Biological Systems, Cambridge University Press, 1980
- P. Gil Ruiz, Productos Naturales, Universidad Pública Navarra, 2002
- F. Pietra, Biodiversity and natural products diversity, Pergamon, Amsterdam, 2002
- J. A. Marco, Química de los Productos Naturales, Síntesis, 2006.
- J. A. Joule, K. Mills, Heterocyclic Chemistry, Wiley, 2010, 5ª edición.
- T. Eicher, S. Hauptmann, A. Speicher The Chemistry of Heterocycles, Wiley-VCH, 2005.
- P. D. Beer, P. A. Gale, D. K. Smith, Supramolecular Chemistry. Oxford University Press, 1999
- A. E. Kaifer, M. Gómez-Kaifer, Supramolecular Electrochemistry, VCH (Weinheim) 1999.
- A. Bianchi, K. Bowman-James, E. García-España (eds), Supramolecular Chemistry of Anions, (Editores), Wiley-VCH (New York), 1997.
- V. Balzani, F. Scandola, E. Harwood, Supramolecular Photochemistry, Wiley-VCH (New York) 1999.
- L. B. Feringa (ed), Molecular Switches, Wiley-VCH (New York) 2001