

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	44712
Nom	Química bioorgànica i química supramolecular
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	3.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2226 - M.U. en Química Orgànica	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2226 - M.U. en Química Orgànica	8 - Química bioorgànica i química supramolecular	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgànica

RESUM

La part de l'assignatura corresponent a Química Bioorgànica tracta de l'estudi de la formació, estructura i activitat biològica dels metabòlits secundaris, compostos produïts pels éssers vius que no són essencials per al creixement, desenvolupament o reproducció dels mateixos però que tenen una funció ecològica. En aquests temes s'introdueix a l'alumne en els diferents grups de productes naturals agrupats sobre la base de la ruta biogenètica a través de la qual es generen. Es descriuen les seqüències sintètiques fonamentals parant atenció a les principals reaccions de tipus bioorgànic implicades. Així mateix, es para atenció a les propietats biològiques dels productes naturals i es comenta la seua importància sota un punt de vista farmacològic, toxicològic i ecològic, quan això siga rellevant.

D'altra banda, la química supramolecular pot definir-se com la química més enllà de la molècula i es basa en les interaccions no covalents que es poden establir entre molècules o espècies carregades. Per aquest motiu, s'inclourà l'estudi dels diferents tipus d'interaccions que es poden produir igual que es discutiran conceptes molt utilitzats en l'àrea de la química supramolecular com són el reconeixement molecular, la *cooperatividad *alostèrica, el *autoensamblaje o les llibreries dinàmiques. Igualment es durà a terme un estudi dels diferents dispositius que es poden produir fent ús d'aquests conceptes així com les seues possibles aplicacions tant en el camp dels materials com en processos biològics.



CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Són imprescindibles per a un bon seguiment dels ensenyaments propis de la matèria: coneixements fonamentals de Química Orgànica.

COMPETÈNCIES

2226 - M.U. en Química Orgànica

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Utilitzar les diferents tècniques d'exposició-oral, escrita, presentacions, panells, etc-per comunicar els seus coneixements, propostes i posicions.
- Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.
- Saber participar en debats i discussions, dirigir-los i coordinar-los i ser capaços de resumir-los i extraure d'ells les conclusions més rellevants i acceptades per la majoria.
- Posseir habilitats socials, un bon nivell de comunicació oral i escrita, així com capacitat per a treballar en equip i amb persones de diferents procedències.
- Competències de gestió com ara la capacitat per a la planificació i gestió de temps i recursos, així com per a dirigir i prendre decisions.
- Ser capaços de valorar la necessitat de completar la seua formació científica, en llengües, en informàtica, assistint a conferències o cursos i/o realitzant activitats complementàries, autoavaluant l'aportació que la realització d'estes activitats suposa per a la seua formació integral.



- Conèixer les rutes biosintéticas generals dels metabòlits secundaris i aplicar els coneixements fonamentals de la reactivitat orgànica a la comprensió dels mecanismes de les reaccions biosintéticas.
- Aprofundir en el coneixement de les propietats fonamentals de les forces intermoleculars i la seua importància en química, biologia i ciència de materials.
- Comprendre la utilitat de la química supramolecular per a la construcció de dispositius moleculars i materials moleculars nanoestructurados.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

Pel que fa a la Química Bioorgànica, els objectius que es pretén aconseguir es resumeixen en els següents punts:

- Conèixer les rutes *biosintéticas generals dels metabòlits secundaris (acetat, *shikimato, *mevalonato, compostos nitrogenats).
- Aplicar els coneixements fonamentals de la reactivitat orgànica a la comprensió dels mecanismes de les reaccions *biosintéticas.
- Aprendre a identificar química i biològicament els diferents grups de metabòlits d'acord amb el seu origen biogenètic.
- Reconèixer els usos i aplicacions més importants dels productes naturals amb particular èmfasi en la investigació de nous fàrmacs
- Estudi de productes naturals amb estructura heterocíclica i la seua importància en els processos biològics.

Pel que fa a la Química Supramolecular, els objectius que es pretenen aconseguir es poden resumir en els següents punts

- Conèixer les propietats fonamentals de les forces intermoleculars i la seua importància en química i biologia.
- Saber aplicar els conceptes de la química supramolecular al disseny i síntesi de receptors moleculars i dispositius moleculars senzills.
- Saber interpretar processos químics i bioquímics el funcionament dels quals es base en interaccions intermoleculars.
- Identificar les forces intermoleculars implicades en l'estabilització d'estructures *multimoleculares així com distingir la seua importància relativa.



- Conèixer els mètodes experimentals utilitzats en la caracterització de sistemes supramoleculars.
- Comprendre la utilitat de la química supramolecular per a la construcció de dispositius moleculars i materials moleculars nanoestructurados.
- Dissenyar, seleccionar i/o desenvolupar productes i processos químics eficients (ODS 7) i que minimitzen el seu impacte sobre el medi ambient (ODS 14 i 15), aprofiten matèries primeres alternatives i generen una menor quantitat de residus (ODS 11).

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Via de l'acetat: àcids grassos i policétidos

Introducció. Metabòlits primaris i secundaris. Policétidos alifàtics. Lípids i compostos relacionats. Prostaglandines, tromboxanos i leucotriens. Macròlidos i polièteres. Policétidos aromàtics.

2. Via del sikimato: aminoàcids aromàtics i fenilpropanoides

Aminoàcids aromàtics i àcids benzoics senzills. Àcids cinàmics. Cumarinas. Metabòlits mixtos (shikimato + acetat): Flavonoides. Isoflavónidos.

3. Ruta del mevalonato: terpens i esteroides

Origen biosintètic dels compostos terpenoides. Monoterpenos (C10). Sesquiterpenos (C15). Diterpenos (C20). Triterpenos (C30). Tetraterpenos (C40). Esteroides: colesterol.

4. Alcaloides: derivats dels aminoàcids

Alcaloides derivats de la tirosina i de la fenilalanina. Alcaloides derivats del triptòfan. Alcaloides derivats de la ornitina i de la lisina. Alcaloides derivats de l'àcid nicotínic.

5. Definició i desenvolupament de la química supramolecular

Relació Receptor-Hoste. Preorganització i complementarietat. Selectivitat cinètica i termodinàmica. Naturalesa de les interaccions supramoleculars. Disseny de receptors.

6. Reconeixement de cations

Èters corona, èters llaç i podandos. Criptandos. Esferandos. Calixarenos, Heterocoronas i criptandos mixtos. Selectivitat en la complejació de cations. Complejació de cations orgànics. Reconeixement quiral.

**7. Reconeixement d'anions**

Conceptes bàsics en el disseny de receptors per a anions. Receptors contenint amines. Receptors derivats del guanidinió. Receptors organometàlics. Receptors neutres.

8. Reconeixement de molècules neutres

Ciclodextrinas i les seues aplicacions. Pincers moleculars. Ciclofanos. Criptofanos. Cavitats covalents: Carcenanos i hemicarcanos. La química supramolecular dels fullerenos.

9. Autoensamblaje.

Autoensamblaje en sistemes sintètics: consideracions cinètiques i termodinàmiques. Autoensamblaje en compostos de coordinació. Autoensamblaje en xarxes metàl·liques. Autoensamblaje a través d'enllaços d'hidrogen. Catenanos i rotaxanos. Helicatos. Nusos moleculars.

10. Extracció i transport

Tècniques d'extracció. Mètodes de determinació de constants d'extracció. Aplicacions. Desactivació de cations. Activació d'anions: Catàlisi de transferència de fase. Tècniques per a l'avaluació de les constants de complejació. Variables que afecten les constants de complejació. Transport a través de membranes. Transport mediat per transportadors. Processos de transport acoblats.

11. Dispositius moleculars

Sistemes interruptors. Fotoquímica i electroquímica supramolecular. Informació i senyalització: sensors químics. Màquines moleculars basades en rotaxanos i catenanos

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	15,00	100
Seminaris	15,00	100
TOTAL	30,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura està plantejada perquè l'estudiant siga el protagonista del seu propi aprenentatge i s'estructura de la següent manera:



- Des del principi de curs els estudiants disposaran de tot el material pedagògic corresponent al curs.
- Classes magistrals (presencials).- En aquestes classes s'introduiran els conceptes bàsics de l'assignatura. Es fomentarà la participació activa de l'alumne mitjançant el plantejament de qüestions relacionades amb l'aplicació de conceptes i coneixements prèviament adquirits per l'alumne.
- Seminaris.- Aquesta activitat docent estarà dedicada a la resolució de problemes i qüestions amb la participació activa de l'estudiant.
- Treballs.- Addicionalment, quan el professor el considere oportú, es proposaran treballs de grup xicotet. Serà desenvolupat per cada grup i consistirà en l'estudi i, si escau, exposició oral d'un cas pràctic, relacionat amb algun dels temes del programa i descrit en una publicació científica. La duració màxima de l'exposició serà de 15 minuts, als quals li seguirà un màxim de 20 minuts de discussió.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'assignatura es durà a terme d'una forma contínua per part del professor al llarg del curs i constarà dels següents apartats.

- **Avaluació directa del professor.** Un 10% de la nota procedirà de l'avaluació directa del professor en les classes teòriques i de problemes i en les tutories. En aquesta avaluació es tindran en compte diferents aspectes, entre els quals cal destacar:
 - Assistència i participació raonada i clara en les discussions plantejades.
 - Progrés en l'ús del llenguatge propi de la química bioorgànica i la química supramolecular
 - Resolució de problemes i plantejament de dubtes.
 - Esperit crític.
 - Lliurament d'exercicis o treballs.
- **Avaluació del treball realitzat per l'estudiant.** Es tindrà en compte tant el contingut com la forma i, si escau, l'exposició i les respostes a les preguntes formulades pels altres estudiants. A aquest apartat li correspondrà un 25% de la nota final.
- **Exàmens o proves orals i escrites.** Un 65% de la nota s'obtindrà a partir dels resultats de les proves orals o escrites, que es realitzaran en els períodes establits per a això.
 - Exàmens d'estil tradicional tant de qüestions teòriques com de problemes, i de continguts relacionats amb la matèria. Aquestes qüestions i problemes seran de tal naturalesa que obliguen l'estudiant a relacionar aspectes diferents que apareguen en diferents temes de l'assignatura o també, si el professor el considera oportú, en diferents assignatures de la matèria.



REFERÈNCIES

Bàsiques

- J. Mann, Secondary Metabolism, Clarendon Press, 1987, 2^a edició.
- P. M. Dewick, Medicinal Natural Products: A Biosynthetic Approach, Wiley 2002, 2^a edició; 2009, 3^a edició.
- 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

Complementàries

- D.L. Nelson y M.M. Cox, Lehninger Principles of Biochemistry, Worth Publishers, 2000, 3^a edició.
- 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, 5^a edició.
- 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