



Guía Docente:

SÍNTESIS ORGÁNICA



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2014-2015



I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA ASIGNATURA:	Síntesis Orgánica
NÚMERO DE CRÉDITOS:	6
CARÁCTER:	Optativa
MATERIA:	Química Orgánica Avanzada
MÓDULO:	Avanzado
TITULACIÓN:	Grado en Química
SEMESTRE/CUATRIMESTRE:	Primero (cuarto curso)
DEPARTAMENTO/S:	Química Orgánica I

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Teoría	Profesor:	LUIS SÁNCHEZ MARTÍN
Seminario	Departamento:	Química Orgánica I
Tutoría	Despacho:	(3ª planta, edificio B)
	e-mail:	lusamar@quim.ucm.es

II.- OBJETIVOS

■ OBJETIVO GENERAL

Desarrollar distintas aproximaciones o estrategias de síntesis de moléculas de complejidad media.

■ OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Seleccionar los reactivos y las reacciones sintéticas en función de criterios estructurales y mecanísticos.
- Comparar la eficiencia de diferentes estrategias sintéticas en términos de economía de átomos, seguridad de manipulación y almacenamiento de reactivos, así como de capacidad de reutilización de catalizadores y disolventes.
- Ser capaz de diseñar procedimientos alternativos o condiciones de reacción eficientes y compatibles con los principios de la *Química Verde* y el desarrollo sostenible.
- Consultar y utilizar la bibliografía propuesta para el desarrollo del curso.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

Conceptos básicos de *Química Orgánica*. Nomenclatura, reactividad, propiedades y estructura de los distintos grupos funcionales. Mecanismos de reacción.



■ RECOMENDACIONES:

Se recomienda a los estudiantes, que se matriculen de esta asignatura, que tengan previamente cursada y superada la materia *Química Orgánica* del módulo Fundamental.

IV.- CONTENIDOS

■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

Contenidos teóricos: Desarrollo de conceptos básicos en Química Orgánica sobre la reactividad de compuestos orgánicos y organometálicos, desde un punto de vista sintético y mecanístico. Se abordará especialmente el estudio de aspectos relacionados con la estereoquímica, conformacionales así como el estudio de efectos estereoelectrónicos. Se desarrollarán estrategias para el diseño de rutas sintéticas de moléculas de complejidad media.

Los contenidos pueden resumirse en los siguientes epígrafes:

El dominio sintético: aproximaciones al objetivo molecular. El mecanismo de la reacción sintética. Selección de reactivos y diseño de reacciones. Métodos selectivos y estereoselectivos de síntesis. Mecanismos de reacción y estereoquímica. Reactivos organometálicos. Catálisis organometálica. Organocatálisis. Técnicas de síntesis y reacciones en medios no convencionales. Optimización de la construcción de entidades moleculares: El principio del mínimo número de etapas y la síntesis orientada a la diversidad molecular.

■ PROGRAMA:

TEÓRICO:

- **TEMA 1. Introducción a la síntesis. Conceptos. Estereoquímica, conformación y estereoselectividad.**
- **TEMA 2. Reacciones de acoplamiento C-C y C-X.**
 - La reacción de Stille.
 - La reacción de Suzuki.
 - La reacción de Heck.
 - La reacción de Sonogashira.
 - Otros métodos representativos.
- **TEMA 3. Síntesis de olefinas.**
 - La reacción de Wittig.
 - La reacción de Wadsworth–Horner–Emmons.
 - La reacción de Peterson.
 - La reacción de metátesis.
 - Otros métodos representativos.
- **TEMA 4. Selectividad. Métodos para la síntesis de productos quirales**
 - Conceptos: Quimio-, regio- y estereoselectividad.
 - Reacciones de sustitución nucleófila vs. eliminación.
 - Regio- y estereoselectividad en reacciones de adición nucleófila a carbonilos.



- La reacción de metátesis.
- Otros métodos representativos.
- **TEMA 5. Reacciones de oxidación y reducción.**
 - Químico-, regio- y estereoselectividad en reacciones redox.
- **TEMA 6. Reacciones pericíclicas.**
 - Conservación de la simetría de orbitales. Análisis FMO (Teoría de Orbitales Moleculares Frontera).
 - Reacciones de cicloadición.
 - Reacciones electrocíclicas.
 - Reacciones sigmatrópicas.
 - Otros métodos representativos.
- **TEMA 7. Mecanismos de reacción. Análisis y diseño sintético.**

Seminarios

1. Resolución de problemas

- Resolución de problemas relacionados con diversos aspectos del diseño sintético que implicarán fundamentalmente:
 - Selección de reactivos y condiciones de reacción.
 - Conocimiento de los mecanismos de reacción implicados en los distintos procesos.
 - Diseño de rutas sintéticas para distintas moléculas objetivo.

V.- COMPETENCIAS

■ GENERALES:

CG1-MA1	Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
CG2-MA2	Valorar la importancia de la Química y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica
CG3-MA2	Relacionar áreas interdisciplinarias en plena expansión, y tomar conciencia de la importancia que la investigación interdisciplinar tiene en el avance de la Ciencia.
CG3-MA1	Demostrar una base de conocimientos y habilidades con las que pueda continuar sus estudios en áreas especializadas de Química o en áreas multidisciplinares.
CG4-MA1	Plasmar los conocimientos específicos de cada materia en el lenguaje científico universal, entendido y compartido interdisciplinariamente.



CG7-MA1	Aplicar conocimientos teóricos y prácticos a la solución de problemas en Química y seleccionar el método más adecuado para resolverlos.
CG8-MA1	Valorar investigaciones y estudios detallados en el campo de la Química.
CG11-MA1	Manejar instrumentación para análisis, síntesis e investigaciones estructurales.
CG13-MA1	Desarrollar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.

■ **ESPECÍFICAS:**

Además de las competencias generales y transversales del módulo y del título, las competencias específicas del título, CE14, CE15, CE16, CE17 y CE30, se desarrollan, para esta materia, en las siguientes (CEMAQO: Competencias específicas del módulo avanzado de la materia Química Orgánica Avanzada):

CE16-MAQO1	Diseñar distintas aproximaciones o estrategias de síntesis de objetivos moleculares de complejidad media.
CE16-MAQO2	Seleccionar los reactivos y las reacciones sintéticas en función de criterios mecanísticos y estructurales.
CE16-MAQO3	Comparar la eficiencia de diferentes estrategias sintéticas en términos de: economía de átomos, seguridad de manipulación y almacenamiento de reactivos, así como de capacidad de reutilización de catalizadores y disolventes.
CE16-MAQO4	Diseñar procedimientos alternativos o condiciones de reacción eficientes y compatibles con los principios de la Química Verde y el Desarrollo Sostenible.

■ **TRANSVERSALES:**

CT1-MA1	Elaborar y escribir memorias e informes de carácter científico y técnico
CT2-MA1	Trabajar en equipo
CT3-MA1	Aprender a tomar decisiones ante un problema real práctico.
CT4-MA1	Seleccionar el método más adecuado para resolver un problema planteado



CT5-MA1	Consultar, utilizar y analizar cualquier fuente bibliográfica
CT5-MA2	Manejar bibliografía y bases de datos especializadas, y de recursos accesibles a través de Internet.
CT7-MA1	Usar programas informáticos que sirvan, en el mundo de la Química, para calcular, diseñar, simular, aproximar y predecir
CT8-MA1	Comunicarse en español utilizando los medios audiovisuales más habituales.
CT11-MA2	Desarrollar trabajo autónomo.
CT12-MA2	Desarrollar sensibilidad hacia temas medioambientales y preservación del medioambiente.

VI. – RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Una vez superada esta asignatura el alumno deberá ser capaz de:

Lección 1

1. Definir y aplicar conceptos fundamentales en química orgánica: Estereoquímica, conformación y estereoselectividad.

Lección 2

1. Ampliar el conocimiento sobre las diferentes reacciones de formación de enlaces C-C utilizando compuestos organometálicos.
2. Conocer el mecanismo general de las reacciones de acoplamiento C-C catalizadas por paladio: Suzuki, Stille, Negishi, Sonogashira y Heck.
3. Conocer el mecanismo general de los ciclos carbonílicos catalizados por paladio para formar enlaces C-C=O.
4. Conocer la selectividad de las reacciones de acoplamiento catalizadas por paladio.
5. Aplicar las reacciones de acoplamiento a la formación de enlaces C-N: reacciones de acoplamiento de tipo Büchwald-Hartwig.
6. Diseñar y justificar la síntesis de moléculas de complejidad media utilizando las reacciones de acoplamiento catalizadas por paladio.

Lección 3

1. Conocer las diferentes reacciones en Química Orgánica que permiten obtener enlaces múltiples C-C.
2. Conocer la selectividad de los diferentes tipos de reacciones de eliminación (E1, E2 y E1CB) para sintetizar dobles enlaces C-C.
3. Conocer las reacciones de tipo Wittig y variantes para preparar dobles enlaces C=C y su diferente selectividad.
4. Conocer las reacciones de metátesis de olefinas catalizadas por complejos rutenio-carbeno.



5. Conocer la homologación de Syferth-Gilbert para sintetizar triples enlaces C-C.
6. Diseñar la síntesis de moléculas de complejidad media utilizando las reacciones de formación de enlaces múltiples C-C.

Lección 4

1. Diferenciar los conceptos de quimio-, regio- y estereoselectividad.
2. Conocer algunas de las reacciones más comunes la selectividad para conseguir estereoselectividad: reacciones SN1 frente a SN2 y E1 frente a E2.
3. Conocer y aplicar el concepto de diastereoselectividad: Creación de más de un centro estereogénico en una misma reacción.
4. Conocer la diastereoselectividad en reacciones de adición electrófila a olefinas.
5. Conocer y predecir la diastereoselectividad en las reacciones de adición nucleófila a compuestos carbonílicos. Aplicar el modelo de Felkin-Anh.
6. Conocer y predecir la estereoselectividad en la reacción de condensación aldólica. Aplicar el método de Zimmermann-Traxler.
7. Aplicar el uso de asistentes quirales en la síntesis diastereoselectiva: Oxazolidinonas de Evans y organocatálisis con enamimas.
8. Diseñar la síntesis estereoselectiva de moléculas de complejidad media.

Lección 5

- 1 Conocer las principales reacciones de reducción quimio-, regio- y estereoselectivas de compuestos orgánicos.
- 2 Conocer las principales reacciones de oxidación quimio-, regio- y estereoselectivas de compuestos orgánicos.
- 3 Aplicar las reacciones de reducción y oxidación como una estrategia fundamental para la interconversión de grupos funcionales en síntesis orgánica.

Lección 6

- 1 Aplicar la teoría de orbitales moleculares frontera para justificar los mecanismos de las reacciones pericíclicas más comunes.
- 2 Conocer la selectividad de las reacciones de cicloadición: reacción de Diels-Alder y cicloadiciones [2+2] y 1,3-dipolares.
- 3 Conocer las reacciones de transposición sigma-trópica: transposiciones [1,n] y [3+3].
- 4 Diseñar la síntesis de moléculas de complejidad media utilizando reacciones pericíclicas.

Lección 7

1. Justificar el resultado químico y estereoquímico de una reacción mediante su mecanismo.
2. Elaborar un plan de síntesis para moléculas de complejidad media utilizando todas las herramientas sintéticas vistas en las Lecciones 1-6.



VII. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos (horas)
Clases teóricas	30	60	3,6 (90)
Seminarios	15	15	1,2 (30)
Tutorías/Trabajos dirigidos	6	9	0,6 (15)
Preparación/exposición de trabajos y exámenes	6	9	0,6 (15)
Total	57	93	6 (150)

VIII.- METODOLOGÍA

Se seguirá una metodología mixta basada en el aprendizaje cooperativo, el aprendizaje colaborativo y el autoaprendizaje. Las actividades presenciales de la asignatura se estructuran en **clases expositivas o magistrales de teoría, clases de seminario, tutorías o actividades dirigidas**.

Clases teóricas presenciales (2 horas/semana durante todo el semestre): estas clases serán expositivas y en ellas se desarrollarán de forma oral los epígrafes que se indican en el programa de la asignatura como clases presenciales, lo que permitirá al alumno obtener una visión global y comprensiva de la misma. Se hará principalmente uso de la pizarra y de presentaciones PowerPoint. Al final del tema se podrán plantear nuevas propuestas que permitan interrelacionar contenidos ya estudiados con los del resto de la asignatura o con otras asignaturas. Previamente a la exposición, todo el material presentado necesario para el seguimiento de las clases estará a disposición de los alumnos en el Campus Virtual y/o en el servicio de reprografía.

Clases de seminario: tendrán como objetivo aplicar los conocimientos adquiridos a un conjunto de cuestiones/ejercicios. Para ello, se proporcionará a los estudiantes una colección de ejercicios relacionados con cada tema de los que consta la asignatura. El profesor explicará algunos ejercicios tipo (que se indicarán como tal en el enunciado) y el resto lo resolverán los estudiantes como trabajo personal. Algunas de las cuestiones estarán relacionadas con aspectos no descritos en el desarrollo teórico de la asignatura, para que los alumnos puedan utilizar los conocimientos adquiridos en la justificación de los hechos planteados en los mismos.

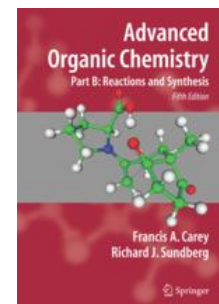
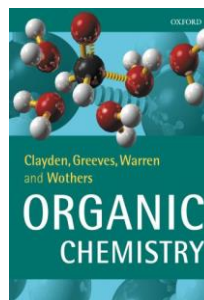
Tutorías presenciales/Actividades dirigidas: se programarán seis sesiones presenciales de tutorías con grupos reducidos de estudiantes. Las tutorías versarán sobre el desarrollo de diversas síntesis planteadas, tanto desde un punto de vista teórico como experimental. También se planteará el desarrollo por parte de los alumnos de diversos tópicos relacionados con la asignatura.

IX.- BIBLIOGRAFÍA

Al principio de curso se comentará la bibliografía recomendada, indicando los aspectos más relevantes de cada texto.

■ BÁSICA:

- Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S. y Wothers, P.: “*Organic Chemistry*”, 2004, Oxford University Press, ISBN-10: 0-198-503466; ISBN-13: 978-0198503460
- Carey, F. A. y Sundberg, R. J.: “*Advanced Organic Chemistry*”, Part B, 5º Ed. 2007, Plenum Press, New York, ISBN: 0-978-0-387-68346-1.



■ COMPLEMENTARIA

- Carey, F. A. y Sundberg, R. J.: “*Advanced Organic Chemistry*”, Part A, 5ª Ed., 2007, Plenum Press, New York.
- Kürti, L. y Czakó, B.: “*Strategic Applications of Named Reactions in Organic Synthesis*”, 2005, Elsevier Academic Press.
- Warren, S. G. y Wyatt, P.: “*Organic Synthesis, the Disconnection Approach*”, 2ª Ed., 2009, John Wiley & Sons, Inc.
- Green, T. W. y Wuts, P. G. M.: “*Protective Groups in Organic Synthesis*”, 3ª Ed., 1999, John Wiley & Sons, Inc.
- Nicolau, K. C. y Sorensen, E. J.: “*Classics in Total Synthesis*”, 1996, VCH: New York.
- Nicolau, K. C. y Sorensen, E. J.: “*Classics in Total Synthesis II*”, 2003, VCH: New York

X-EVALUACIÓN

Para la evaluación final es obligatoria la participación en las diferentes actividades propuestas. Es obligatoria la asistencia a todas las tutorías dirigidas. Para poder acceder a la evaluación final será necesario que el estudiante haya participado al menos en el 70% de las actividades presenciales.

El rendimiento académico del estudiante y la calificación final de la asignatura se computarán, de forma ponderada, atendiendo a los porcentajes que se muestran en cada uno de los aspectos recogidos a continuación. Todas las calificaciones estarán basadas en la puntuación absoluta sobre 10 puntos, y de acuerdo con la escala establecida en el RD 1125/2003. Este criterio se mantendrá en todas las convocatorias.

■ EXÁMENES ESCRITOS:

Examen final:	45%
---------------	-----



Los conocimientos adquiridos se evaluarán mediante la realización de un examen final al que deberán presentarse todos los alumnos. El examen constará de preguntas sobre aplicación de conceptos aprendidos durante el curso. Será necesario obtener una puntuación mínima de 4 sobre 10 para ser evaluado.

Se valorarán las competencias: CG5, CG6, CG13, CT3, CT4, CT11, CE14, CE15, CE16, CE16-MAQO1, CE16-MAQO2, CE16-MAQO3.

Pruebas de control/exámenes:

35%

Se realizará un examen sobre los conceptos más importantes de los temas impartidos hasta el momento.

Se valorarán las competencias: CG5, CG6, CG13, CT3, CT4, CT11, CE14, CE15, CE16, CE16-MAQO1, CE16-MAQO2, CE16-MAQO3.

■ **TRABAJO PERSONAL Y ACTIVIDADES DIRIGIDAS (Tutorías):**

Tutorías:

15%

Se evaluarán los conocimientos adquiridos en los trabajos presentados o discutidos en tutorías mediante:

- Calidad del trabajo presentado
- Conocimientos adquiridos

Se valorarán las competencias: CG1 a CG8; CT1-MA1, CT2-MA1, CT3-MA1, CT4-MA1, CT5-MA1, CT5-MA2, CT8-MA1, CT11-MA2; CE14, CE15, CE16; CE16-MAQO1, CE16-MAQO2, CE16-MAQO3.

Asistencia y participación activa en las clases:

5%

La asistencia a las actividades presenciales, y la participación activa del alumno en todas las actividades docentes se valorará positivamente en la calificación final. Se valorará especialmente con un 5% de la nota final la participación y resolución de problemas en las clases de seminarios.

Se valorarán las competencias: CG1 a CG8; CG1-MA1, CG2-MA2, CG3-MA1, CG4-MA1, CG8-MA1, CG13-MA1; CT3-MA1, CT4-MA1, CT5-MA1, CT5-MA2, CT11-MA2; CE1, CE2, CE3, CE8, CE9, CE14, CE15, CE16, CE16-MAQO1, CE16-MAQO2, CE16-MAQO3

■ **CONVOCATORIA DE SEPTIEMBRE**

Examen de septiembre:

45%

La evaluación continua del curso se tendrá en cuenta en la convocatoria de septiembre. El examen de dicha convocatoria tendrá el mismo valor que el de la convocatoria de junio, siendo de la misma forma considerado. El examen constará de preguntas sobre aplicación de conceptos aprendidos durante el curso. Será necesario obtener una puntuación mínima de 4 sobre 10 para ser evaluado.

Se valorarán las competencias: CG5, CG6, CG13, CT3, CT4, CT11, CE14, CE15, CE16, CE16-MAQO1, CE16-MAQO2, CE16-MAQO3.



PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	GRUPOS	INICIO	FIN
1. Introducción a la síntesis. Conceptos. Estereoquímica, conformación y estereoselectividad.	Clases Teoría	2	1	1ª Semana	1ª Semana
2. Reacciones de acoplamiento C-C y C-X.	Clases Teoría	6	1	1ª Semana	4ª Semana
	Seminarios	4			
3. Síntesis de olefinas	Clases Teoría	4	1	5ª Semana	6ª Semana
	Seminarios	2			
	Tutoría programada*	2	1	6ª Semana	
4. Selectividad. Métodos para la síntesis de productos quirales	Clases Teoría	9	1	7ª semana	11ª Semana
	Seminarios	5			
	Tutoría programada*	2	1	10ª Semana	
	Examen	1	1	11ª Semana	
5. Reacciones de oxidación y reducción.	Clases Teoría	3	1	11ª Semana	12ª Semana
	Seminarios	1	1		
6. Reacciones pericíclicas.	Clases Teoría	5	1	13ª Semana	15ª Semana
	Seminarios	3	1		
7. Análisis y diseño sintético.	Clases Teoría	1	1	15ª Semana	15ª Semana
			1		
	Tutoría programada*	2	1	13ª Semana	
	Examen Final	2,5	1	Semanas de exámenes febrero	

* Las tutorías programadas (al igual que los exámenes) están sujetas a posibles modificaciones según la planificación del resto de asignaturas del curso.



RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES

Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
Clases de teoría	CG1 a CG8 CG1-MA1,CG2-MA2,CG3-MA1, CG4-MA1, CG8-MA1, CG13-MA1 CT3-MA1, CT4-MA1, CT5-MA1, CT5-MA2, CT11-MA2 CE1, CE2, CE3, CE8, CE9, CE14, CE15, CE16, CE16-MAQO1, CE16- MAQO2, CE16-MAQO3	Preparación del material. Exposición de conceptos teóricos	Asistencia y participación activa en las mismas. Toma de apuntes. Preparación de material. Formulación de preguntas y dudas	Calificación de las respuestas (planteamiento y resultado) realizadas por escrito para la resolución de ejercicios prácticos y teóricos	30	60	90	
Seminarios	Las mismas que para las clases de teoría	Preparación del material Aplicación de la teoría a la resolución de ejercicios y problemas.	Asistencia y realización de las tareas encargadas por el profesor. Realización de ejercicios. Formulación de preguntas y dudas	Calificación de las respuestas (planteamiento y resultado) realizadas por escrito o de forma oral, relacionadas con la resolución de los seminarios planteados	15	15	30	10%
Tutorías	CG1 a CG8 CT1-MA1, CT2-MA1, CT3-MA1, CT4-MA1 CT5-MA1, CT5-MA2, CT8-MA1, CT11-MA2 CE14, CE15, CE16 CE16-MAQO1, CE16-MAQO2, CE16-MAQO3	Propuesta de estudio de diversos tópicos, preparación de material y evaluación	Consulta al profesor sobre las dificultades conceptuales y metodológicas que encuentra al estudiar la materia. Preparación mediante consulta bibliográfica Elaboración del material pertinente.	Calificación en función de la calidad del material preparado Nivel de conocimientos adquiridos evaluados mediante preguntas orales.	6	9	15	20%
Exámenes	CG5, CG6, CG13, CT3, CT4, CT11, CE14, CE15, CE16, CE16-MAQO1, CE16-MAQO2, CE16-MAQO3	Propuesta, vigilancia y corrección de los exámenes. Calificación del alumno	Preparación y realización de los exámenes	Valoración del examen escrito	6	9	15	70%

P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación