



Master en Ciencia y Tecnología Químicas
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Complutense de Madrid

Guía docente:
ESTRUCTURA Y SÍNTESIS
QUÍMICA: MÉTODOS Y
ESTRATEGIAS DE SÍNTESIS
ORGÁNICA

Código: 605198

Curso 2011-2012

Nombre de la asignatura (Subject name)

Estructura y síntesis química: Métodos y Estrategias de Síntesis Orgánica
Structure and Chemical synthesis: Organic Synthesis. Methods and Strategies

Duración

Primer semestre

Créditos ECTS /Carácter

6.0 Créditos ECTS / obligatoria

Contenidos básicos (Subject knowledge)

Conocimiento de los aspectos relacionados con el diseño y construcción de entidades moleculares, de carácter orgánico u organometálico, haciendo especial énfasis en el conocimiento profundo de las reacciones sintéticas y sus mecanismos.

Design and construction of molecular entities (organic and organometallic species). Exhaustive study of current synthetic reactions and their corresponding reaction mechanisms.

Profesores y ubicación

Profesor	Israel Fernández López
Departamento	Química Orgánica I
Correo electrónico	israel@quim.ucm.es

Objetivos y competencias (Abilities and Skills)

OBJETIVOS

- 1.- Proporcionar una base sólida y equilibrada de conocimientos sobre estrategias de síntesis orgánica que permitan predecir el resultado estereoquímico de una reacción, seleccionar los reactivos y las reacciones sintéticas en función de criterios estructurales y mecanísticos, haciendo especial hincapié en las diferentes estrategias sintéticas
- 2.- Desarrollar en el estudiante capacidades que le permitan aplicar sus conocimientos en entornos nuevos o dentro de contextos poco conocidos tanto químicos como multidisciplinarios.
- 3.- Desarrollar herramientas de aprendizaje que permitan a los estudiantes continuar su formación de un modo autodirigido o autónomo.
- 4.- Generar en el estudiante el gusto por la investigación científica.

OBJECTIVES

1.- *To give the proper basis of knowledge on different strategies towards the synthesis of target molecules. Predict and explain the stereochemical outcome of a reaction. Select the reactants and synthetic reactions depending on structural and mechanistic criteria, making special emphasis in the effectiveness of different synthetic strategies.*

2.- *To develop theoretical and practical abilities to solve relevant scientific problems in synthesis of target molecules. To critically analyze, evaluate, and generate new and complex ideas in new field of chemistry and related areas.*

3.- *To develop learning tools that allow the students their formation in an autonomous manner.*

4.- *To induce in the student the enjoyment for research activities.*

COMPETENCIAS GENERALES

CG1.- Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de problemas en el área de estudio de la síntesis de moléculas orgánicas.

CG2.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para resolver problemas de interés científico y social en el contexto de la síntesis orgánica.

CG4.- Reconocer y evaluar la calidad de los resultados teóricos y prácticos utilizando las herramientas adecuadas.

CG5.- Utilizar y reconocer la tecnología de los materiales para poder resolver problemas en el entorno de los mismos.

CG8.- Aplicar las técnicas de caracterización adecuadas al sistema objeto de estudio.

GENERAL SKILLS

GS1.- *To integrate the knowledge on organic synthesis and to face up the complexity of questions in the area.*

GS2.- *To develop capabilities on theory and practice to resolve interesting scientific and social questions in the context of organic synthesis.*

GS4.- *To recognize and evaluate the quality of theoretical and practical results by using the proper tools.*

GS5.- *To use and recognize the technology of study organic synthesis in order to solve questions on the area.*

GS8.- *To apply the suitable methodologies of characterization to the considered synthetic problems.*

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE2.- Planificar la experimentación de acuerdo a modelos teóricos o experimentales establecidos.

CE3.- Utilizar programas informáticos que permitan plantear y resolver problemas sobre el estudio de síntesis orgánica.

CE4.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para la caracterización y análisis de diferentes tipos de moléculas.

CE5.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para relacionar la estructura de las moléculas con su función.

CE7.- Correlacionar la composición con la estructura y propiedades de las sustancias

SPECIFIC SKILLS

SS2.- *To design the research according to theoretical and experimental established models.*

SS3.- *To use of computational tools to ask and answer questions on the study of the organic synthesis.*

SS4.- *To develop capabilities on theory and practice for the characterization and analysis of different types of molecules.*

SS5.- *To develop capabilities on theory and practice to establish relationships between structure and function of molecules.*

SS7.- *To recognize the relationship between structure and properties of the molecules.*

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

CT1.- Elaborar, escribir y defender informes de carácter científico y técnico.

CT2.- Trabajar en equipo.

CT3.- Valorar la importancia de la sostenibilidad y el respeto al medio ambiente.

CT4.- Demostrar capacidad de auto-aprendizaje.

CT5.- Demostrar compromiso ético.

CT6.- Comunicar resultados de forma oral/escrita.

CT7.- Trabajar con seguridad en laboratorios de investigación.

CT8.- Demostrar motivación por la investigación científica.

GENERIC COMPETENCES

GC 1.- *To elaborate, write, and defend scientific and technical reports.*

GC 2.- *To work in multidisciplinary teams.*

GC3.- *To understand the importance of respecting and preserving the environment.*

GC4.- *To demonstrate the ability to learn independently.*

GC5.- *To show ethical commitment.*

GC6.- *To communicate results orally and in writing.*

GC7.- *To work safely in research laboratories.*

GC8.- *To show motivation for scientific research.*

Contextualización en el Máster

Esta asignatura pertenece al módulo 1, obligatorio, que consta de dos materias, de carácter obligatorio, diferentes (1.1 “Experimentación y Modelización Avanzada en Química” y 1.2 “Estructura y Síntesis Químicas”). En concreto, esta asignatura forma parte de la materia 1.2.

Programa de la asignatura

1. **Análisis y Diseño Sintético**

- Tipos de Síntesis.
- Análisis Sintético: objetivos, pasos en el diseño y ejecución de una síntesis.
- Análisis y reconocimiento de enlaces estratégicos.
- Ejemplo: Estrategias para la síntesis del Longifoleno.

2. **Síntesis Asimétrica**

- Concepto de Síntesis Asimétrica. Definiciones.
- Determinación del resultado sintético. El problema de la pureza óptica.
- Condiciones para la reacción asimétrica. Tipos de reacciones asimétricas. Auxiliares quirales externos e internos.
- Fuentes de sintones quirales.

3. **Oxidaciones y Reducciones Asimétricas**

- Oxidaciones Estereoselectivas: Epoxidación asimétrica, Dihidroxilación asimétrica y Aminohidroxilación asimétrica.
- Reducciones:
 - o Hidrogenación Estereoselectiva
 - o Hidroboración Asimétrica
 - o Reacciones de Reducción Irreversibles: estereoquímica de la adición de hidruros y otros nucleófilos a compuestos carbonílicos.
 - o Modelos de Cram, Felkin-Anh, Cieplak y control por quelación. Ejemplos.

4. **Química de Enolatos**

- Generación y Estructura de Enolatos.
- Estereoquímica de las Reacciones de Alquilación
 - o Enolatos exocíclicos, endocíclicos y otros sistemas conformacionalmente no flexibles.
 - o Alquilaciones asimétricas. Transferencia de quiralidad: conformacional o intraanular, por quelación, extraanular y a través de interacciones espaciales.
- Condensación Aldólica
 - o Generalizaciones y origen de la diastereoselectividad.
 - o Enolatos de boro.
 - o Condensación aldólica con enolatos quirales.
 - o Reacciones aldólicas asimétricas.
- Equivalentes aldólicos: organoboranos quirales, allilsilanos y alilestannos.
- Dianiones enolatos.
- Metaloiminas, enaminas y otros equivalentes de enolatos relacionados.
- Alquilación de enolatos extendidos.

5. **Formación Estereoselectiva de Enlaces C–C Mediante Reacciones Pericíclicas**

- Inducción Asimétrica en Cicloadiciones: [4+2], [3+2] y [2+2] .

- Adición Estereoselectiva de Carbenos.
- Transferencia de Quiralidad en Reordenamientos Sigmatrópicos: [3,3], [2,2], reacción énica.

6. Ejemplos de Síntesis Totales

Metodología y programación docente

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 y actividades dirigidas**.

Clases teóricas presenciales (3,6 créditos, 36 horas, durante el primer 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 uso de la pizarra y de presentaciones de tipo 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.

Clases de seminario: (1,2 créditos) tendrán como objetivo aplicar y complementar 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. 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. Algunos de los seminarios serán empleados para la exposición por parte de los estudiantes de estrategias de síntesis publicadas recientemente en la literatura química.

Tutorías presenciales/Actividades dirigidas: se programarán seis sesiones presenciales de tutorías con grupos reducidos de estudiantes sobre distintas estrategias sintéticas relacionadas con el temario de la asignatura. Se pretende utilizar las tutorías para aclarar las posibles dudas de los ejercicios propuestos en seminarios.

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos (horas)
Clases teóricas	36	54	3.6 (90)
Seminarios	12	18	1.2 (30)
Tutorías/Trabajos dirigidos	6	9	0.6 (15)
Preparación de trabajos y exámenes	6	9	0.6 (15)
Total	60	90	6 (150)

Evaluación del aprendizaje

Para la evaluación final es obligatoria la participación en las diferentes actividades propuestas. Es obligatorio asistir a todas las tutorías dirigidas, así como a todas las sesiones de seminario. Para poder acceder a la evaluación final será necesario que el estudiante haya participado al menos en el 70% de las actividades presenciales y presentado una estrategia sintética para un compuesto determinado.

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.

El rendimiento académico se evaluará atendiendo a la participación del estudiante en los problemas tratados (40%), a la presentación de trabajos (40%), y a la calificación de un examen (20%).

Idioma o idiomas en que se imparte

Castellano

Bibliografía y recursos complementarios

Básica:

- *Lecture Notes. Modern Organic Synthesis*. D. L. Boger. The Scripps Research Institute Press, 1999 (versión en CD disponible).
- *Stereoselective Synthesis*. M. Nogradi. Wiley-VCH, 1994.
- *The Logic of Chemical Synthesis*. E. J. Corey, X. Cheng. Wiley-VCH, 1989.

- *Organic Synthesis: Concepts and Methods*. J. Fuhrhop, G. Li, 3^a ed., Wiley-VCH, 2003.
- *Stereoselective Synthesis*. Robert S. Atkinson. Wiley-VCH, 1995.
- *Organic Synthesis, The Disconnection Approach*. S. G. Warren, New York: Wiley 1982.

Complementaria:

- *Organic Chemistry*, J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, Oxford University Press, 2004.
 - *Advanced Organic Chemistry*, F. A. Carey, R. J. Sundberg, Part B, 5^o ed., Plenum Press, New York, 2007.
 - *Classics in Total Synthesis*. K. C. Nicolaou, E. J. Sorensen. Wiley-VCH, 1995.
 - *Classics in Total Synthesis II*. K. C. Nicolaou, S. A. Snyder. Wiley-VCH, 2003.
- Dead Ends and Detours: Direct Ways to Successful Total Synthesis*. M. A. Sierra, M. C. De la Torre, Wiley-VCH, 2004