

SÍNTESIS ORGÁNICA Y DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL

Curso 2015/2016

(Código:61033077)

1. PRESENTACIÓN DE LA ASIGNATURA

Nombre de la asignatura: *Síntesis Orgánica y Determinación Estructural*.

Curso: 3º

Semestre: 2º

Carácter: Obligatorio

Nº de créditos ECTS: 6, que equivalen a 150 horas

Módulo: Materias Fundamentales

Materia: Química Orgánica

Desde que Wöhler sintetizó la urea en 1828, millones de moléculas orgánicas, de mayor o menor complejidad, han sido sintetizadas hasta nuestros días. El proceso sintético puede considerarse como un arte o como una ciencia. Así, Woodward (Premio Nobel de Química en 1965) lo describió como una fuente de emoción, provocación y aventura, atribuyéndole el calificativo de «arte noble». Por el contrario, Corey (Premio Nobel de Química en 1990) considera que la síntesis orgánica es una actividad esencialmente lógica y racional.

En la actualidad, y según el Profesor Nicolaou de los prestigiosos Institutos Scripps de La Jolla, la investigación y el desarrollo de la síntesis orgánica contiene dos enfoques principales que se encuentran interrelacionados: La preparación de moléculas y el desarrollo de nuevos métodos de síntesis.

Las moléculas complejas contienen un variado número de grupos funcionales que, anclados convenientemente en diversos lugares del esqueleto carbonado, dan lugar a estructuras de procedencia natural o diseñadas por el hombre. La creación y transformación de los grupos funcionales necesarios para sintetizar la molécula deseada, requiere una secuencia de pasos (o etapas) dirigidos, que puede llevarse a cabo de forma lineal o convergente. En la síntesis lineal las reacciones se realizan de manera consecutiva desde los productos de partida. Sin embargo, la síntesis convergente implica la preparación independiente de parte de los productos que intervienen en la secuencia sintética. Ambas rutas pueden conducir a la misma molécula pero, la elección de una u otra puede ser decisiva en el rendimiento global. En general, las rutas convergentes conducen a rendimientos más elevados y, por tanto, son más rentables económicamente.

Para que una síntesis de productos naturales o de diseño sea considerada como síntesis total, debe de partir de reactivos que se puedan obtener desde de sus elementos. Cuando se utilizan productos de partida elaborados y que resultan fácilmente accesibles (procedimientos descritos o comerciales), la síntesis se denomina síntesis parcial o semisíntesis. Sin embargo, en la síntesis orgánica moderna ambos términos han evolucionado, y se utiliza el término de síntesis total para aquellos procesos dirigidos a la preparación de moléculas a partir de fragmentos sencillos. En la práctica, la realización de síntesis totales implica las siguientes fases: 1) selección de la molécula objetivo: producto natural o de diseño; 2) elaboración de la estrategia sintética: análisis



retrosintético; 3) selección de los reactivos y condiciones: tácticas y 4) Ejecución experimental de la síntesis: destreza y trabajo experimental en el laboratorio.

El trabajo sintético está íntimamente ligado al análisis orgánico que permite elucidar las estructuras obtenidas en el proceso sintético. En los últimos años ha habido un gran incremento en la evaluación de resultados de reacciones químicas determinado por una amplia variedad de métodos físicos; con la ayuda de estas técnicas se han abierto nuevos campos de investigación en áreas como inorgánica, orgánica y bioquímica, ya que estos métodos son muy eficaces. La mayoría de los métodos físicos de determinación de estructuras moleculares pueden clasificarse como miembros de una gran familia como es la difracción y la espectroscopía. La determinación de estructuras en Química Orgánica se hace con técnicas espectroscópicas como son: Espectroscopía Ultravioleta-visible (UV); Resonancia Magnética Nuclear (RMN); Espectroscopía Infrarroja (IR) y Espectrometría de Masas (MS). Los métodos espectroscópicos tienen mucha importancia en Química Orgánica, y pueden ser bastante específicos a la hora de elucidar la estructura de los componentes de una mezcla y su proporción relativa. En este contexto, la espectroscopía es usada ampliamente para ver las transformaciones que se producen en una reacción química de los reactivos a los productos.

2.CONTEXTUALIZACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS

El título de Graduado/a en Química tiene como finalidad principal la obtención por parte del estudiante de una formación general en Química, orientada a la preparación para el ejercicio de actividades de carácter profesional.

La asignatura que aquí se presenta pertenece al conjunto de asignaturas que constituye la materia Química Orgánica del Grado y se integra dentro del módulo de Materias Fundamentales de carácter obligatorio.

Esta asignatura desarrolla gran parte las competencias genéricas y específicas del título, en especial las que se detallan a continuación:

Competencias genéricas

- Planificación y organización.
- Manejo adecuado del tiempo.
- Análisis y síntesis.
- Aplicación de los conocimientos a la práctica.
- Razonamiento crítico.
- Toma de decisiones.
- Motivación por la calidad.
- Comunicación y expresión oral y escrita.
- Comunicación y expresión matemática, científica y tecnológica.
- Competencia en el uso de las TIC.
- Competencia en la búsqueda de información relevante.
- Competencia en la gestión y organización de la información.
- Competencia en la recolección de datos, el manejo de bases de datos y su presentación.
- Habilidad para coordinarse con el trabajo de otros.

Competencias específicas

- Conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- Conocimiento de la terminología química: nomenclatura, términos, convenios y unidades.
- Conocimiento de los principales elementos y compuestos orgánicos e inorgánicos, así como biomoléculas, sus rutas sintéticas y su caracterización.
- Una base de conocimientos que posibilite continuar los estudios en áreas especializadas de Química o áreas multidisciplinares y en múltiples dominios de aplicación, tanto tradicionales como nuevos.
- Capacidad de aplicar los conocimientos de Química a un desarrollo sostenible en los contextos industrial, económico, medioambiental y social.
- Manejo de los modelos abstractos aplicables al estudio de la Química.
- Capacidad para relacionar la Química con otras disciplinas.
- Conocimiento de los principios fisicoquímicos fundamentales que rigen la Química.



3. REQUISITOS PREVIOS REQUERIDOS PARA CURSAR LA ASIGNATURA

Es recomendable que antes de cursar esta asignatura se tengan superadas las asignaturas de primer curso que forman parte de la materia "Química", así como las asignaturas *Química Orgánica I* y *Química Orgánica II*, de segundo curso del grado en Química. Es aconsejable cursar las asignaturas que comprenden cada materia de acuerdo al orden presentado en el plan de estudios.

4. RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Predecir el resultado de transformaciones orgánicas desconocidas y diseñar síntesis de moléculas sencillas.
- Planificar y realizar una síntesis orgánica de un modo racional.
- Aplicar el análisis retrosintético y evaluar la reactividad e interconversión de grupos funcionales.
- Conocer los procedimientos de formación de los enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo desde el punto de vista de la regio- y estereoselectividad del proceso.
- Utilizar los mecanismos de reacción como instrumento para explicar, predecir y controlar las reacciones orgánicas.
- Comprender las correlaciones entre la estructura molecular y las características espectroscópicas.
- Comprender y predecir el comportamiento y reactividad de grupos funcionales y moléculas a partir del análisis de su estructura obtenida mediante datos espectroscópicos.
- Desarrollar habilidades para la aplicación de las técnicas espectroscópicas a la elucidación estructural de los compuestos orgánicos.

5. CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

El programa de la asignatura está dividido en dos Bloques Temáticos; el primero de ellos, constituido por seis Temas, está dedicado al estudio de la Síntesis Orgánica. En ellos se presentan los conceptos y métodos que permiten la aplicación del análisis retrosintético, la evaluación de la reactividad e interconversión de grupos funcionales, las estrategias para la formación de enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo, etc.

El segundo Bloque temático, también constituido por seis temas, está dedicado al estudio de las técnicas espectroscópicas más utilizadas en Química Orgánica. En ellos se pretende dar una visión general de cada una de estas técnicas: Espectroscopía Infrarroja (IR), Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) y Espectrometría de Masas (EM), discutiendo en primer lugar los principios teóricos para, posteriormente, estudiar su aplicación a ejemplos concretos que permitan comprender con facilidad la correlación espectro-estructura.

BLOQUE TEMÁTICO 1

TEMA 1. Concepto y estrategias en Síntesis Orgánica.

TEMA 2. Formación de enlaces carbono-carbono I: Reacciones de compuestos organometálicos.

TEMA 3. Formación de enlaces carbono-carbono II: Carbaniones estabilizados por grupos atrayentes de electrones.

TEMA 4. Carbaniones estabilizados por fósforo y azufre. Derivados orgánicos del silicio.

TEMA 5. Formación de enlaces carbono-heteroátomo. Formación y apertura de ciclos.

TEMA 6. Grupos protectores. Organoboranos.



BLOQUE TEMÁTICO 2

TEMA 7. Espectroscopia Infrarroja: Conceptos Básicos y aplicación al análisis cualitativo.

TEMA 8. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear: Fundamentos físicos, técnica de pulsos y transformada de Fourier.

TEMA 9. Desplazamiento químico y constantes de acoplamiento.

TEMA 10. Resonancia Magnética Nuclear de carbono-13. Elucidación estructural.

TEMA 11. Espectrometría de masas. Fundamentos y tipos de espectrómetros. Tipos de fragmentos.

TEMA 12. Elucidación estructural por espectrometría de masas.

6.EQUIPO DOCENTE

- [PALOMA BALLESTEROS GARCIA](#)

7.METODOLOGÍA Y ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE

La metodología de estudio de la asignatura *Síntesis Orgánica y Determinación Estructural* está basada en la modalidad de enseñanza a distancia, para lo cual se dispone de un profesorado en la Sede Central (Equipo Docente) y del Profesor Tutor, siempre con el apoyo del uso de las TIC. Tiene gran importancia en este tipo de enseñanza el trabajo autónomo, con el apoyo docente a través del correo ordinario, correo electrónico, medios virtuales, foros de debate, teléfono y reuniones presenciales.

Los contenidos de esta asignatura se encuentran recogidos en unidades didácticas editadas por la UNED, además se le suministrarán al estudiante, a través del curso virtual, lecturas complementarias relacionadas con la materia.

Esta asignatura es de carácter teórico y para llevar a cabo su aprendizaje es necesario realizar una serie de *actividades formativas* que se distribuyen en dos grupos:

1. Actividades basadas en el trabajo autónomo del estudiante, entre las que se encuentran:

Estudio de los contenidos teóricos.

Realización de las actividades de Evaluación Continua (2).

Realización de las actividades propuestas en línea (curso virtual).

Realización de las Pruebas Presenciales.

2. Actividades relacionadas con la interacción del estudiante con el equipo docente de la Sede Central y con el Profesor Tutor.

Para el estudio de cada tema es recomendable seguir las siguientes etapas:

1. Estudiar los contenidos teóricos.
2. Realizar los ejercicios de autocomprobación sin ayuda del texto y consultar las soluciones que vienen a continuación para comprobar su nivel de aprendizaje.
3. Complementar el estudio, en caso necesario, con la consulta de la bibliografía recomendada o textos complementarios que se indiquen en el curso virtual .
4. Para la resolución de las dudas que le puedan surgir también puede recurrir al curso virtual, en el foro del equipo docente-guardia virtual, donde el Equipo Docente le responderá oportunamente.



Esta asignatura tiene asociados 6 créditos ECTS que equivalen a 150 horas de trabajo del estudiante. El Equipo Docente ha estimado que estas horas pueden distribuirse como se indica en la siguiente tabla:

TRABAJO AUTÓNOMO	HORAS	ECTS
Lectura de las orientaciones de la Guía de estudio. Estudio de los contenidos recogidos en los textos básicos	100	4
Resolución de ejercicios, problemas, exámenes de otros años	19	0,76
Realización de pruebas de Evaluación continua	9	0,36
Realización de la Prueba Presencial	2	0,08
TOTALES	130 (86,7%)	5,20
INTERACCIÓN CON ENTORNOS VIRTUALES (CURSO VIRTUAL)	HORAS	ECTS
Lectura de contenidos del curso virtual	6	0,24
Interacción con el equipo docente y con el profesor tutor por medio de los foros y por correo electrónico Interacción con otros estudiantes en el foro establecido para ello. Realización de actividades en línea	14	0,56
TOTALES	20 (13,3%)	0,80
TOTALES	150	6,00

8.EVALUACIÓN

La asignatura cuenta con una serie de actividades mediante las que se llevará a cabo la evaluación final:

El estudiante podrá optar por dos modalidades de evaluación:

1. Evaluación única de la Prueba Presencial (PP).
2. Evaluación Continua. Consistirá en la evaluación tanto de la Prueba Presencial como de dos Pruebas de Evaluación Continua (PEC) realizadas a lo largo del curso.

Prueba Presencial (PP) (de carácter obligatorio)

Al ser una asignatura a cursar durante el segundo semestre habrá una Prueba Presencial en la convocatoria de junio y otra, para los que no la superen, en la de septiembre. La duración de la prueba será de dos horas.

La prueba o examen constará de dos partes: Una de ellas comprenderá cuestiones relativas a la Síntesis Orgánica y la otra consistirá en la resolución de un problema de determinación estructural en base a los datos espectroscópicos aportados. Para la realización de este problema se autorizará al estudiante la utilización de los textos de tablas de Elucidación Estructural mencionados en el apartado de *Comentarios y Anexos* de esta guía.

Esta prueba se llevará a cabo en los Centros Asociados, en el horario indicado en el calendario de pruebas



presenciales elaborado por la UNED.

Pruebas de Evaluación Continua (PEC) (de carácter voluntario)

La evaluación continua consistirá en la resolución de dos pruebas de evaluación a distancia que el estudiante resolverá en su domicilio con el material que considere oportuno, aunque se recomienda que intente realizarlas al ir estudiando cada tema, sin consultar material, y únicamente en caso de duda recurrir al material didáctico.

Estas PEC se entregarán a través del curso virtual mediante la herramienta de "tareas", en una fecha determinada que se indicará en el curso virtual. Su corrección y calificación será realizada por el Profesor Tutor o por el Equipo Docente. Tanto la PEC-1 como la PEC-2 consistirán en ejercicios y problemas relacionados con los temas 1-6 de Síntesis Orgánica y los temas 7-12 de Determinación estructural.

La ponderación de la evaluación continua, de carácter voluntario, en la calificación final será de hasta 1 punto (0,5 puntos por PEC) en función del trabajo realizado por el estudiante, siempre y cuando dichas PEC sean entregadas en las fechas indicadas y se obtenga una calificación igual o superior a 4 puntos en la Prueba Presencial.

Evaluación Final

En caso de que el estudiante decida no realizar las PEC la calificación final será únicamente la de la Prueba Presencial.

Si el estudiante opta por la evaluación continua realizando las dos PEC, la calificación final será aditiva, es decir, la nota (máximo 0,5 puntos por PEC) se sumará a la obtenida en la Prueba Presencial, siempre y cuando ésta última sea igual o superior a un 4.

Actividad	Carácter	Tipo de corrección	Fecha de realización	Peso en la calificación final
Prueba Presencial (PP)	Obligatorio	Equipo Docente	Calendario de Pruebas Presenciales	80%-100% *
Prueba de Evaluación Continua 1 (PEC-1)	Voluntario	Profesor Tutor o Equipo Docente	Se indicará en el curso virtual	Suma hasta 0,5 puntos a la calificación de la PP
Prueba de Evaluación Continua 2 (PEC-2)	Voluntario	Profesor Tutor o Equipo Docente	Se indicará en el curso virtual	Suma hasta 0,5 puntos a la calificación de la PP

*

Dependiendo del tipo de evaluación elegido

9.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13): 9788407005019

Título: TABLAS PARA LA DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL POR MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS (trad. act. de la 3ª ed. alemana)

Autor/es: Pretsch, E. ; Martínez Alvarez, Roberto ; Herrera Fernández, Antonio ;

Editorial: Springer

Buscarlo en Editorial UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación



ISBN(13): 9788436227048

Título: SÍNTESIS ORGÁNICA (1ª)

Autor/es: Cabildo Miranda, Mª Del Pilar ; Sanz Del Castillo, Dionisia ; Ballesteros García, Paloma ; Claramunt Vallespí, Rosa Mª ;

Editorial: UNED

Buscarlo en Editorial UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

ISBN(13): 9788436228045

Título: ANÁLISIS ORGÁNICO (1ª)

Autor/es: Teso Vilar, Enrique ; García Fraile, Amelia ;

Editorial: UNED

Buscarlo en Editorial UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Comentarios y anexos:

Aunque se recomiendan los dos textos, no todos los temas en ellos recogidos constituyen el programa de la asignatura. En la segunda parte de la guía se darán las instrucciones necesarias para el estudio de cada uno de ellos.

Para la realización de problemas, es imprescindible que el estudiante consulte el libro: *Tablas para la elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos* de E. PRETSCH, T. CLERC y otros. Ed. Alhambra, Madrid, 1990. Esta edición está agotada, por lo que es probable que resulte difícil encontrarla en las librerías, se recomienda aquí porque en las UDD se hace referencia a ella en numerosas ocasiones. En su defecto, puede utilizarse con el mismo fin el texto de tablas *Determinación estructural de compuestos orgánicos* de E. PRETSCH, P. BÜHLMANN y otros, Ed. SPRINGER, Barcelona, 2001.

10.BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

Los textos editados por la UNED que se indican en la Bibliografía básica son autosuficientes, pero si el estudiante quisiera consultar bibliografía complementaria, el equipo docente recomienda los siguientes textos:

BALLESTEROS, P.; CLARAMUNT, R. M.; SANZ, D. y TESO, E.: *Química Orgánica Avanzada*. 1ª ed. UNED, 2002, 09424UD11.

BALLESTEROS, P.; LÓPEZ, P. y ZADERENKO, P.: *Ejercicios resueltos de Síntesis Orgánica*. Cuadernos de la UNED,



1.^a ed. 2005, 35262CU01A01.

CARRUTHERS, W.: *Some Modern Methods of Organic Synthesis*. 4^a ed. Cambridge University Press, 2004.

HOUSE, H. O.: *Modern Synthetic Reactions*. 2^a ed. Benjamin. 1972.

MARCH, J.: *Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure*. 5^a ed. John Wiley, 2001.

NORMAN, R. O. C.: *Principles of Organic Synthesis*. 2^a ed. Chapman and Hall, 1993.

SMITH, M. B. y MARCH, J.: *March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure*. 6^a ed. John Wiley, 2007.

SMITH, M. B.: *Organic Synthesis*. 2^a ed. McGraw-Hill, 2001.

WARREN, S.: *Organic Synthesis. The Disconnection approach*. 1^a ed. repr. Ed. John Wiley, 1996.

STUART, B. H.: *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications*. Wiley. New York, 2004. ISBN: 978-0-470-85428-0.

FRIEBOLIN, H.: *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, 5^a ed. Wiley, New York, 2011. ISBN: 978-3-527-32782-9.

McLAFFERTY, F. W.: *Interpretation of Mass Spectra*. University Science Books, Hill Valley. California, 1993. ISBN 978-0-935702-25-5.

SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X. y KIEMLE, D.: *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 7^a ed. Wiley, New York, 2005. ISBN: 978-0-471-39362-7.

FIELD, L. D.; STERNHELL, S. y KALMAN, J. R.: *Organic Structures from Spectra*. 4^a ed. Wiley-VCH, New York, 2008. ISBN: 978-0-470-31927-7

Una dirección electrónica que puede ser de interés para disponer de problemas resueltos es:

<http://riodb.ibase.aist.go.jp/riohomee.html>

11.RECURSOS DE APOYO

Los principales medios materiales de apoyo que podrán utilizar los estudiantes de esta asignatura son los siguientes:

Curso Virtual

Se desarrollará en la plataforma "aLF" habilitada al efecto en la web de la UNED. En ella el estudiante encontrará materiales necesarios para la preparación de la asignatura tales como, temas que componen el programa, ejercicios, enlaces de Internet que se consideren de interés para el estudio de la asignatura, etc. Este medio es una herramienta fundamental de comunicación entre los estudiantes y el Equipo Docente, los estudiantes y los Profesores Tutores y entre los propios estudiantes. A través del Curso Virtual, el Equipo Docente informará de los cambios y/o novedades que vayan surgiendo. Por consiguiente, es fundamental que todos los estudiantes matriculados utilicen esta plataforma virtual para el estudio de la asignatura.

Biblioteca

El estudiante podrá disponer de los fondos bibliográficos tanto en la Biblioteca Central como en las Bibliotecas de los Centros Asociados de la UNED. A través de la web de la biblioteca podrá hacer uso de los recursos online.

12.TUTORIZACIÓN



El Equipo Docente tutorizará y seguirá el aprendizaje de los estudiantes a través del Curso Virtual de la asignatura en la plataforma aLF de forma telemática, que será la principal herramienta de comunicación entre el estudiante, el Profesor Tutor y el Equipo Docente. En dicho curso podrán desarrollarse tutorías virtuales.

La forma de contactar con el Equipo Docente será utilizando el curso virtual, bien a través del correo de Equipo Docente para consultas privadas, o bien a través de los foros para consultas públicas. También podrán realizar consultas en el horario de guardia de la asignatura en la Sede Central, excepto en períodos de vacaciones, días no lectivos y semanas de celebración de exámenes.

Los profesores se encuentran en la Sede Central cuya dirección es:

Facultad de Ciencias de la UNED
Paseo Senda del Rey, 9
28040 Madrid

En la Tabla que se muestra a continuación se indica el teléfono y la dirección de correo electrónico de todos los Profesores que integran el Equipo Docente de la asignatura, así como el horario de atención.

Profesor / a	Horario de atención	Teléfono	Correo electrónico
Paloma Ballesteros García	Martes 15:00- 19:00 h	91 3987320	pballesteros@ccia.uned.es

