

Progettare una sintesi multistadio

Nel progettare la sintesi di un composto organico si tiene conto di diversi fattori, che possono essere tra loro collegati:

- Tempo
- Costo
- Resa
- Rischio
- Impatto ambientale

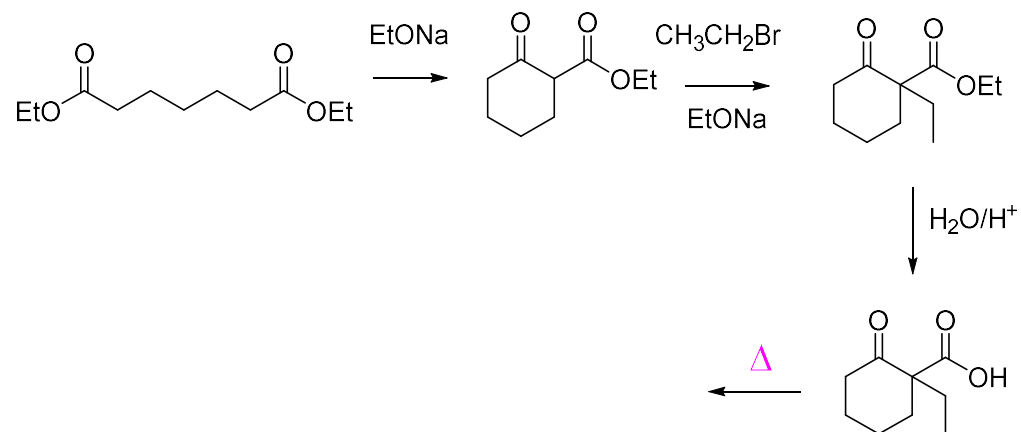
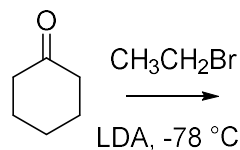
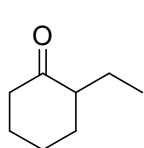
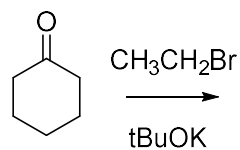
Il processo ideale usa reagenti e materiali di partenza di basso costo, processi che non comportano temperature e pressioni estreme (da fornire o sviluppate), produrre i prodotti con alte rese, utilizzare solventi e reagenti (e produrre sottoprodotti) non pericolosi.

In generale, si cerca il percorso di sintesi che richiede il minor numero di passaggi, ma in altri casi sarà preferito un percorso più lungo perché consente rese più alte o abbassa i costi.

Non potendo conoscere costi e problemi pratici inerenti le sintesi progettate, nei corsi di chimica organica ci concentra sui percorsi che consentano di minimizzare i passaggi e non ottenere sottoprodotti.

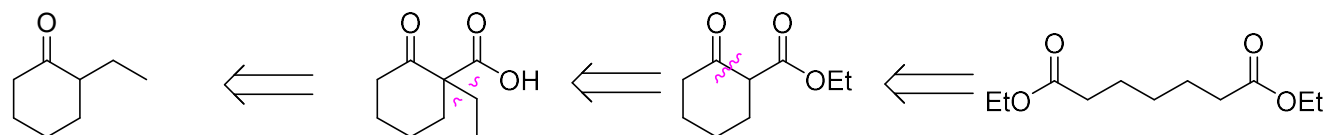
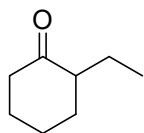
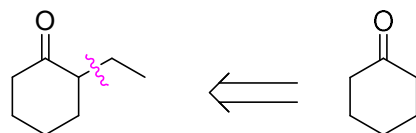
Progettare una sintesi multistadio

Resa, condizioni e numero di passaggi



Progettare una sintesi multistadio

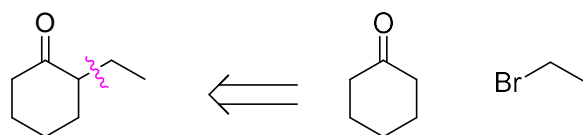
Sintesi e retrosintesi



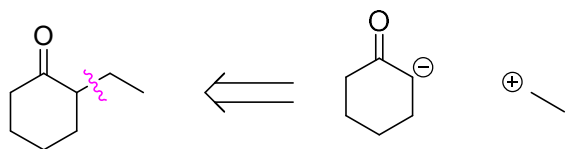
Progettare una sintesi multistadio

Disconnessioni

La **disconnessione** è una tecnica che facilita l'analisi retrosintetica: consiste nell'individuare quali legami **possono essere rotti** per generare frammenti che corrispondono a reagenti noti. Individuare un sito di disconnessione corrisponde ad individuare nella molecola bersaglio un legame che può essere formato da una reazione nota.



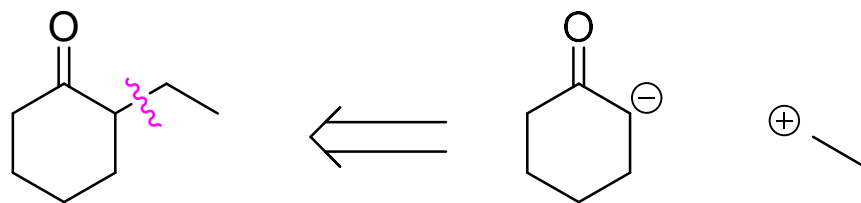
Spesso, l'individuazione dei reagenti viene aiutata dall'individuazione dei **sintoni**. I sintoni sono frammenti ionici generati dall'ipotetica rottura omolitica di un legame:



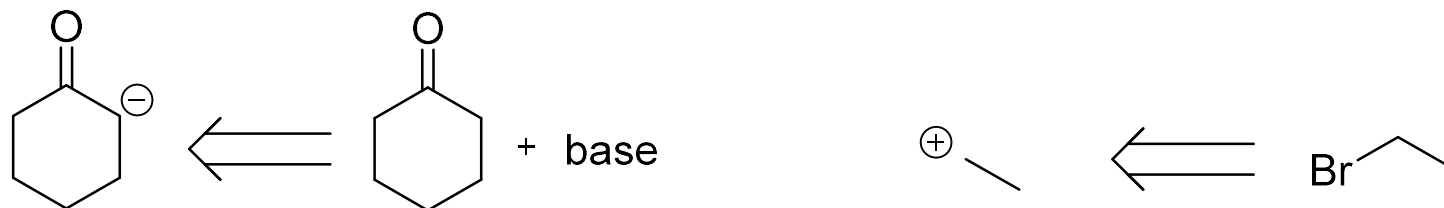
Progettare una sintesi multistadio

Sintoni ed equivalenti sintetici

I sintoni possono corrispondere ad intermedi realmente presenti nella reazione, ma non è necessario che lo siano.

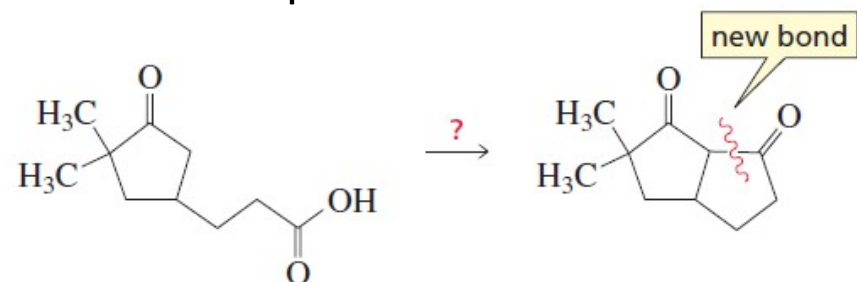


L'equivalente sintetico è il reagente utilizzato come sorgente «formale» del sintoni

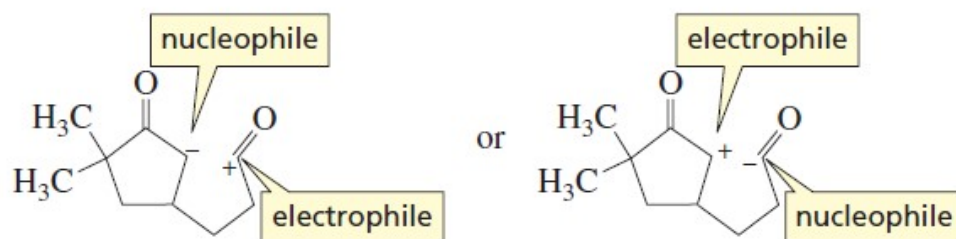


Progettare una sintesi multistadio

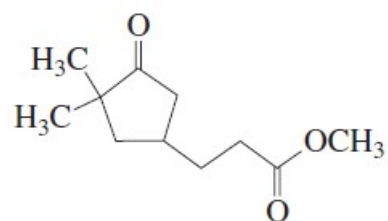
Sintoni ed equivalenti sintetici



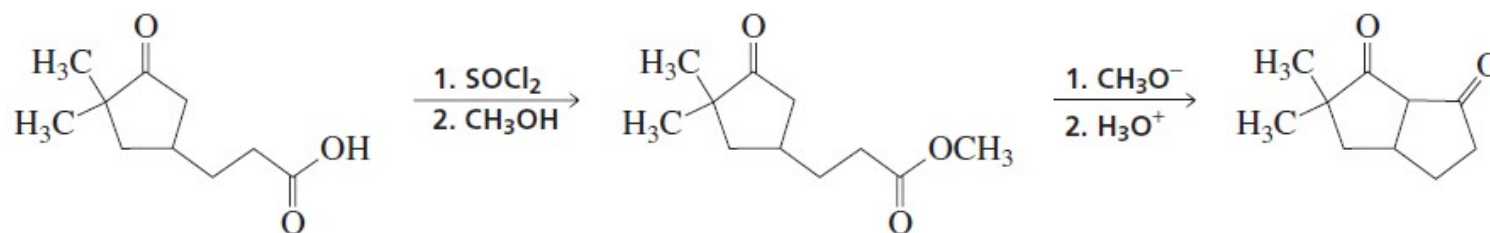
Disconnessione (carbonile 1,3)



Sintoni



Equivalente sintetico

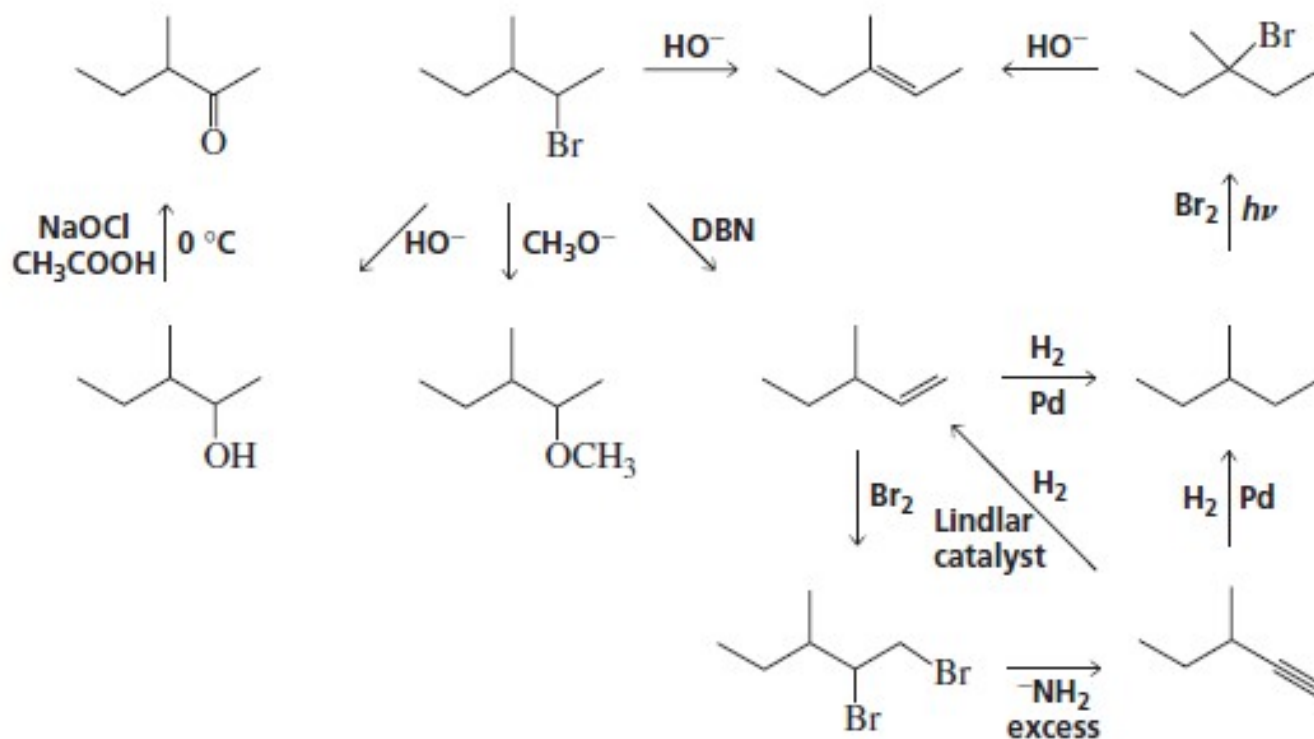


Sintesi

Progettare una sintesi multistadio

Trasformazione di gruppi funzionali

Se lo scheletro degli atomi di carbonio non cambia, la trasformazione ha solo modificato i gruppi funzionali coinvolti



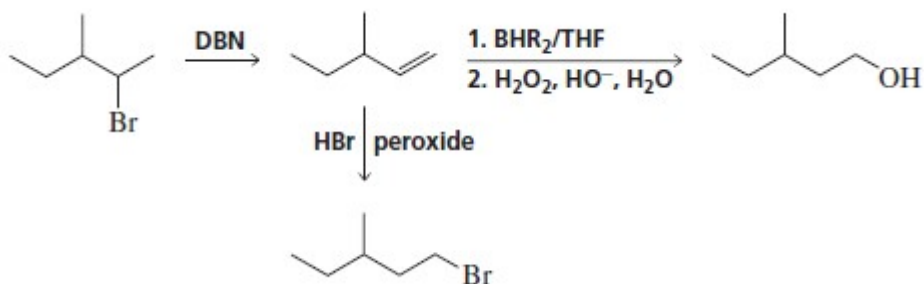
Progettare una sintesi multistadio

Trasformazione di gruppi funzionali

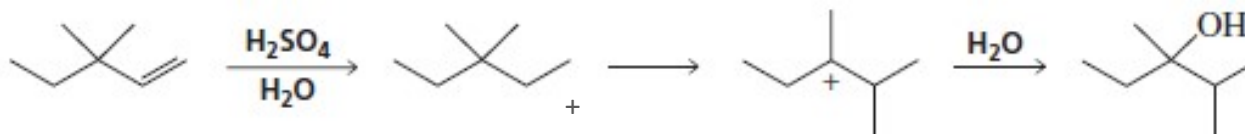
Le reazioni radicaliche possono funzionalizzare gli alcani



Se un gruppo funzionale si è spostato in una posizione adiacente, probabilmente la reazione è passata attraverso un alchene

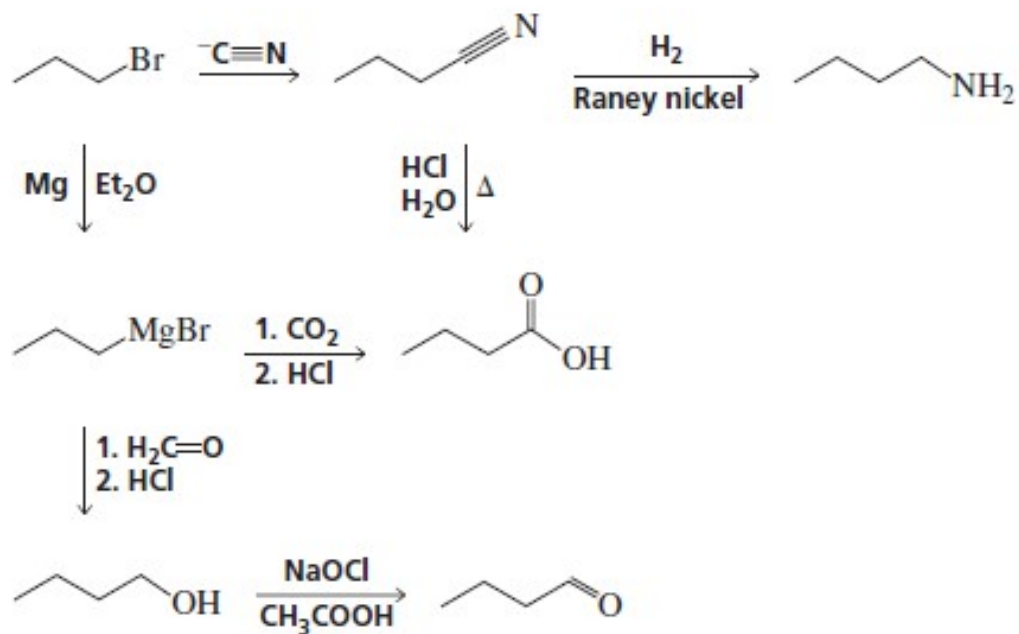


Se lo scheletro di atomi di carboni si è modificato (con un numero costante di atomi), è probabilmente avvenuta una trasposizione



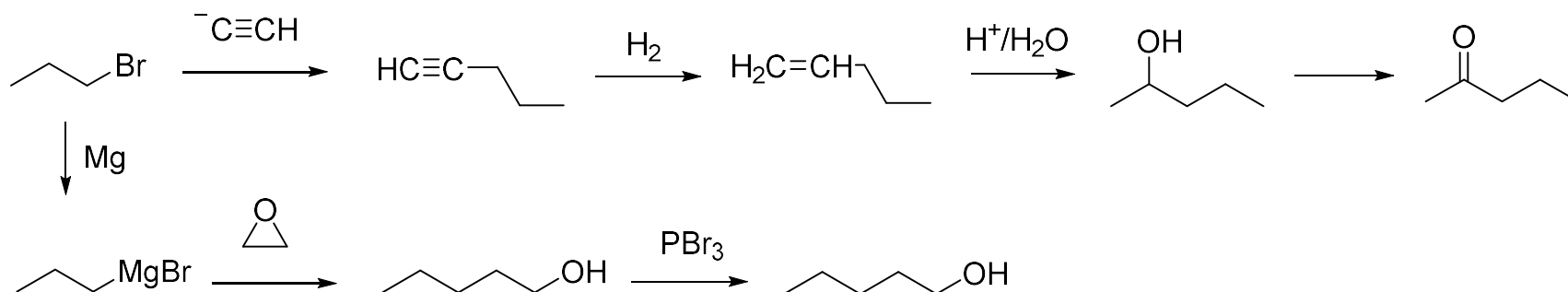
Progettare una sintesi multistadio

Allungamenti di catena di un atomo di carbonio



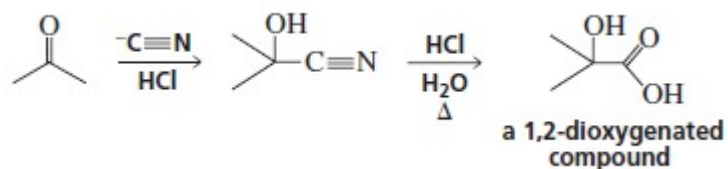
Progettare una sintesi multistadio

Allungamenti di catena di due atomi di carbonio

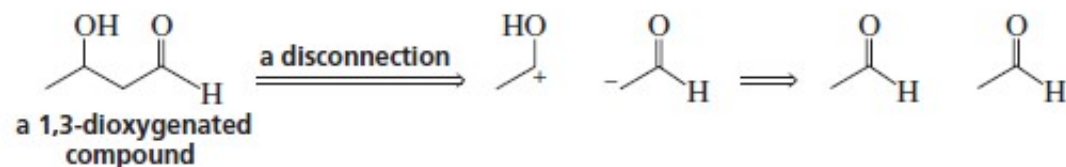


Progettare una sintesi multistadio

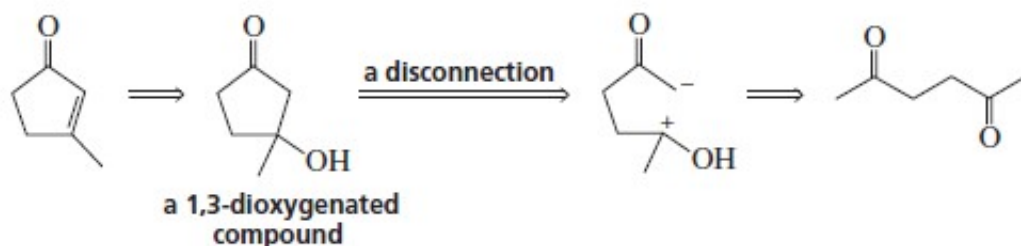
Usare i gruppi funzionali per individuare le disconnessioni



Composti 1,2 diossigenati

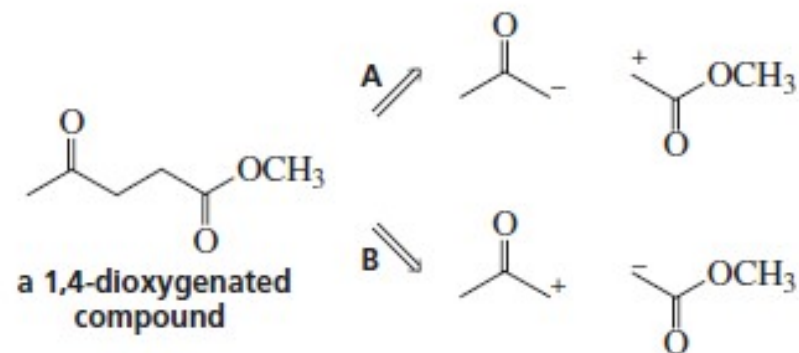


Composti 1,3 diossigenati

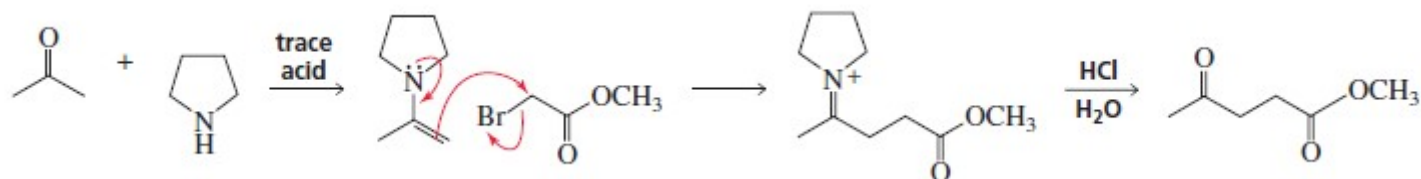


Progettare una sintesi multistadio

Usare i gruppi funzionali per individuare le disconnessioni

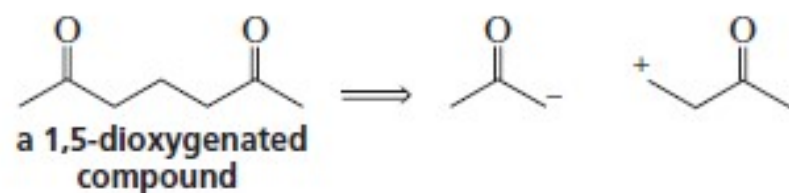


Composti 1,4 diossigenati

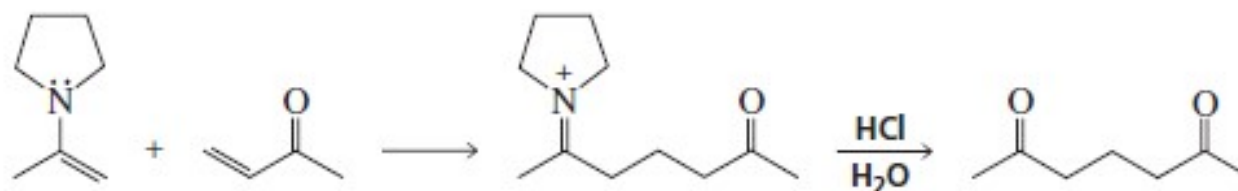


Progettare una sintesi multistadio

Usare i gruppi funzionali per individuare le disconnessioni

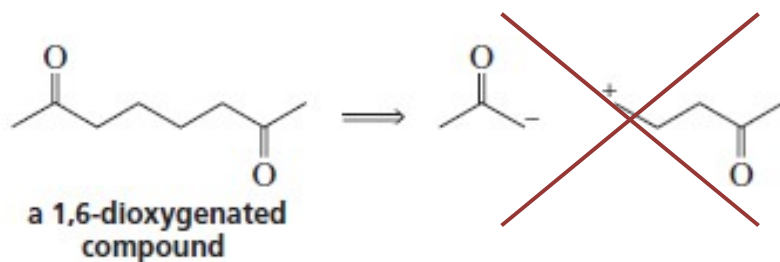


Composti 1,5 diossigenati

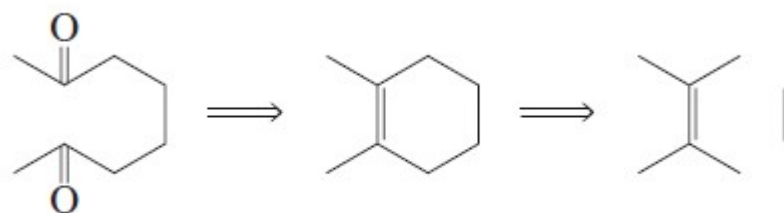


Progettare una sintesi multistadio

Usare i gruppi funzionali per individuare le disconnessioni

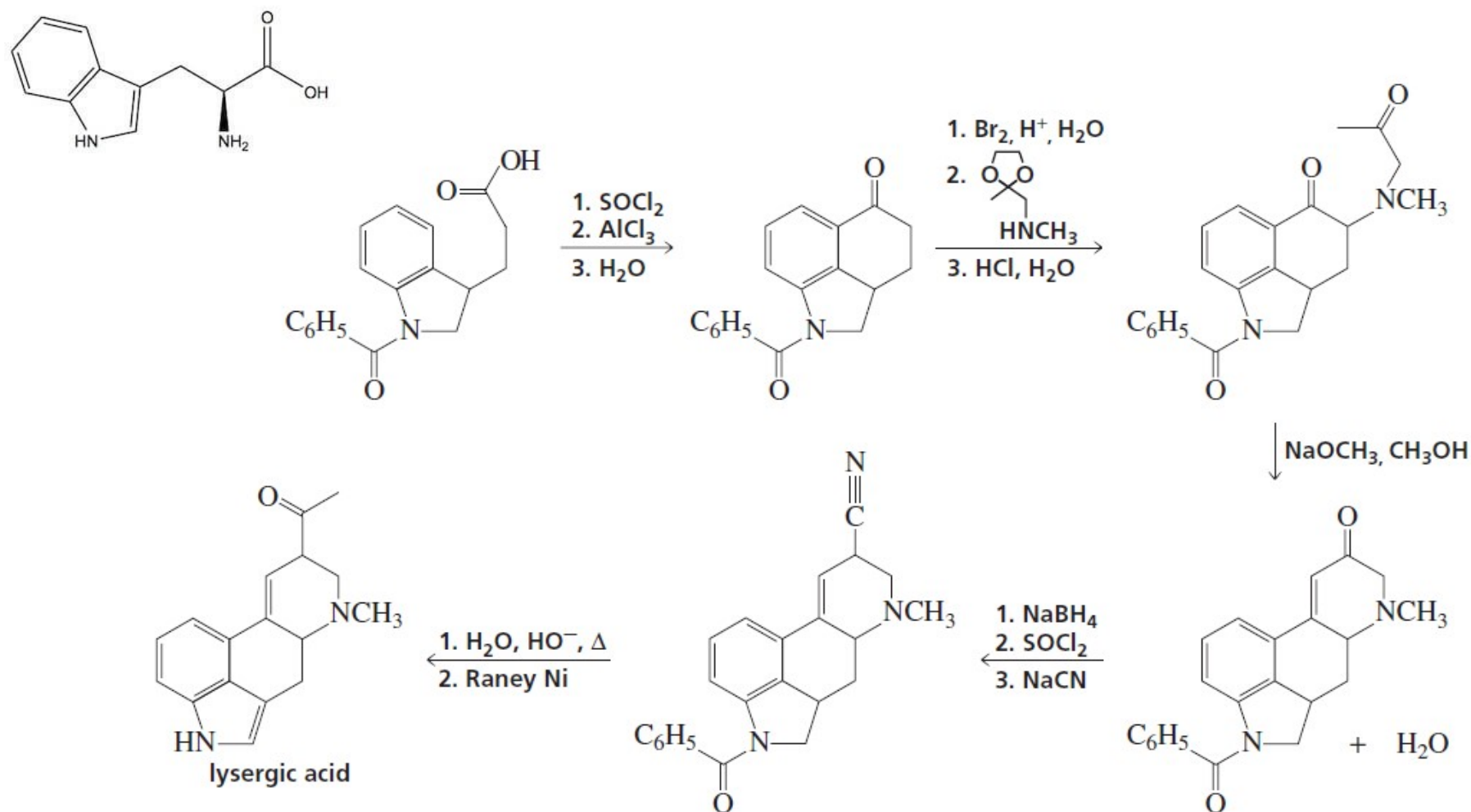


Composti 1,6 diossigenati



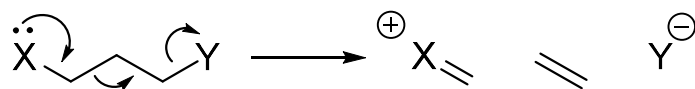
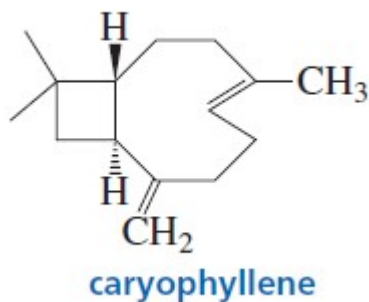
Progettare una sintesi multistadio

Sintesi dell'LSD di R.B. Woodward

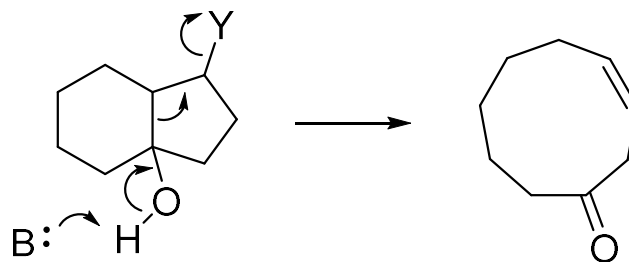


Progettare una sintesi multistadio

Sintesi del cariofillene di R.B. Woodward ed E. J. Corey

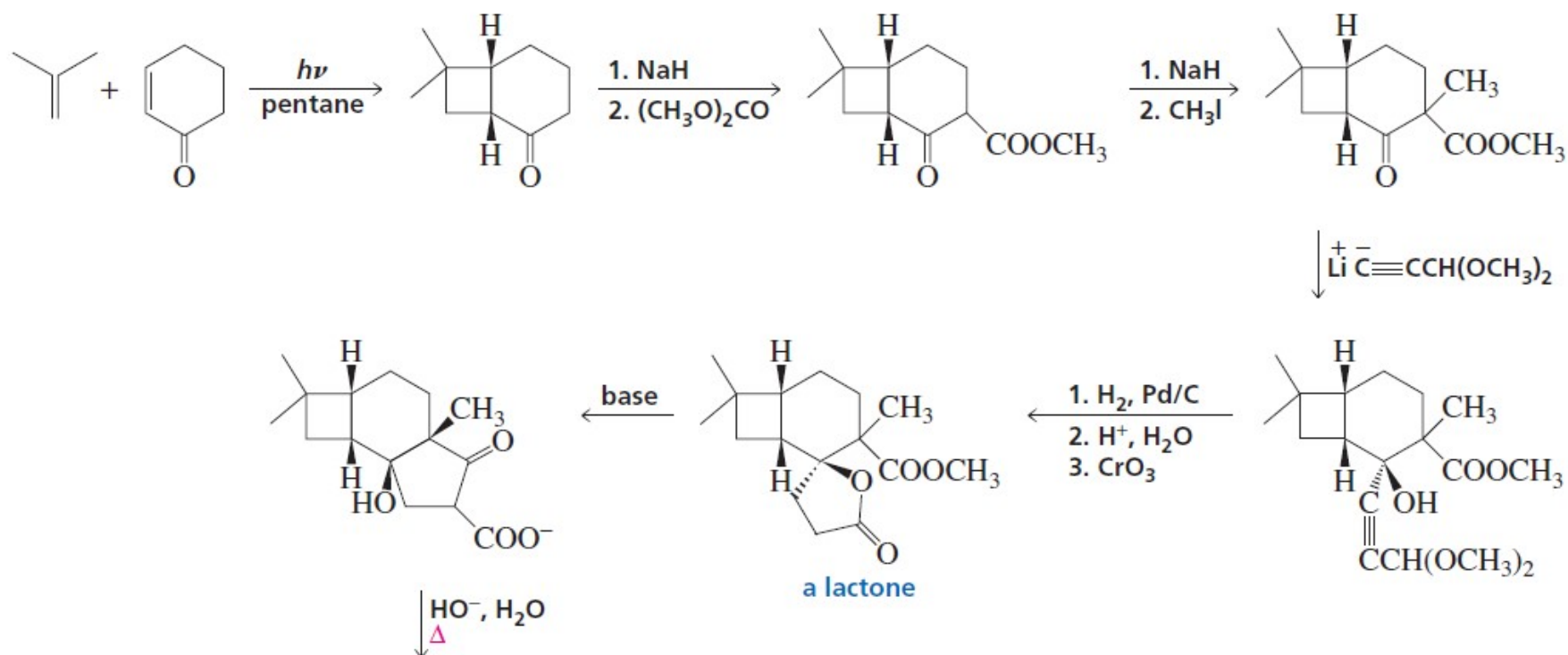
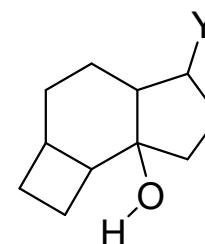


Grob fragmentation of
1,3-diheterosubstituted
compounds.



Progettare una sintesi multistadio

Sintesi dell'LSD di R.B. Woodward ed E. J. Corey



Progettare una sintesi multistadio

Sintesi del cariofillene di R.B. Woodward ed E. J. Corey

Grob fragmentation of
1,3-diheterosubstituted
compounds.

