Índice

1. Introducción 3
1.1 Apartado 1 4
1.2 Apartado 2 6
1.3 Apartado 3 6
1.3.1 Apartado 3.1 6
1.3.2 Apartado 3.2 6
2. Objetivos 7
3.Resultados y discusión 9
4. Conclusiones 12
5. Parte experimental 14
5.1 Condiciones generales 15
5.2 Apartado 5.2 15
6. Anexos 17

Resumen

El resumen del trabajo en castellano, inglés y gallego con un máximo de 250-300 palabras. También hay que incluir palabras clave. El resumen debe recoger, de manera breve, objetivos, técnicas utilizadas, resultados, e interés del trabajo realizado (aplicaciones).

Summary

Resumo

Abreviaturas y acrónimos

AcOEt: acetato de etilo

DCM: 1,2-diclorometano

equiv: equivalentes

h: horas

Hex: hexanos

R: sustituyente

Rto: rendimiento

T: temperatura

t: tiempo

t.a.: temperatura ambiente

THF: tetrahidrofurano

TLC: cromatografía en capa fina

X: halógeno

RMN: Resonancia magnética nuclear

d: doblete

dd: doble doblete

dt: doble triplete

Hz: hercios

J: constante de acoplamiento

m: multiplete

q: cuadruplete

s: singulete

t: triplete

1. Introducción

1.1 Apartado 1

En el apartado de introducción se exponen los antecedentes poner a los lectores en situación. Se deben exponer de forma ordenada y con coherencia las metodologías seleccionadas empleadas hasta la fecha para la síntesis de los compuestos objeto de estudio. Se deben incluir referencias a todos los trabajos citados. Las referencias bibliográficas irán como nota al pie de página (en el menú seleccionar referencia e insertar nota al pie) justificadas en Times New Roman a 10 puntos con interlineado sencillo con sangría francesa en 0.7 ptos.

A modo de ejemplo: En la bibliografía, existen sensores de cationes, en los que el anillo de imidazol actúa a través del átomo de nitrógeno tipo piridina. En el sensor de Fe^{+3} (*Figura 1*), la interacción con el catión se produce entre los nitrógenos del imidazol y del grupo oxima, provocando un cambio en sus espectros de absorción UV/Vis y de emisión de fluorescencia.[1]

Cuando se repite una referencia: insertar referencia cruzada y en el desplegable seleccionar nota al final y seleccionar la que corresponda. Una vez insertada ponerla en superíndice

A modo de ejemplo:

Texto.[1c]

[1] (a) Kuzu, B.; Tan, M.; Ekmekci, Z.; Menges, N. *J. Luminescence.* **2017**, *192*, 1096. (b) Chemistry of Aluminium, Gallium, Indium and Thallium; Downs, A. J., Ed.; Springer: New York, 1993. (c) Ranu, B. C. *Eur. J. Org. Chem*. **2000**, 2347.

Se puede utilizar imágenes, gráficas, tablas, dibujos, etc a lo largo del texto, indicando la fuente de procedencia. El título que se pondrá al pie de la figura en tamaño Times New Roman 10 con interlineado sencillo.

A modo de ejemplo:

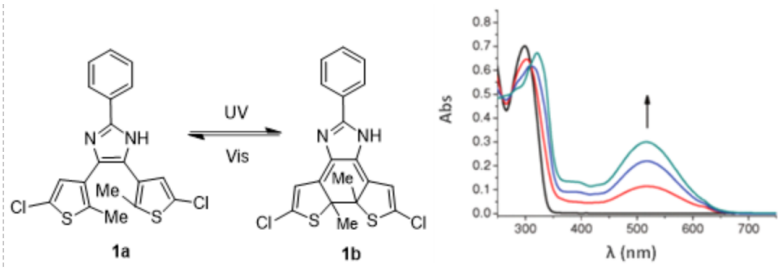


Figura 1. Fotoisomerización del dietileteno **1a** y su espectro de absorción en CH_3CN (extraído de *J. Phys. Chem*. **2009**, *113*, 5550).

Es recomendable que todos los esquemas ChemDraw tengan las mismas preferencias. Para ello, en Química, se recomienda seguir las preferencias de la American Chemical Society (ACS). En el programa *ChemDraw* click en File y buscar la opción *apply document settings from ACS Document 1996*. Emplear *test captions*: Arial 10 y *Atom labels*: Arial 10. Se pueden usar colores para indicar el tipo de reacción. Se recomienda insertar los esquemas en Word al 90% y siempre modificarlos y guardarlos en formato *ChemDraw* (véase Anexos ChemDraw).

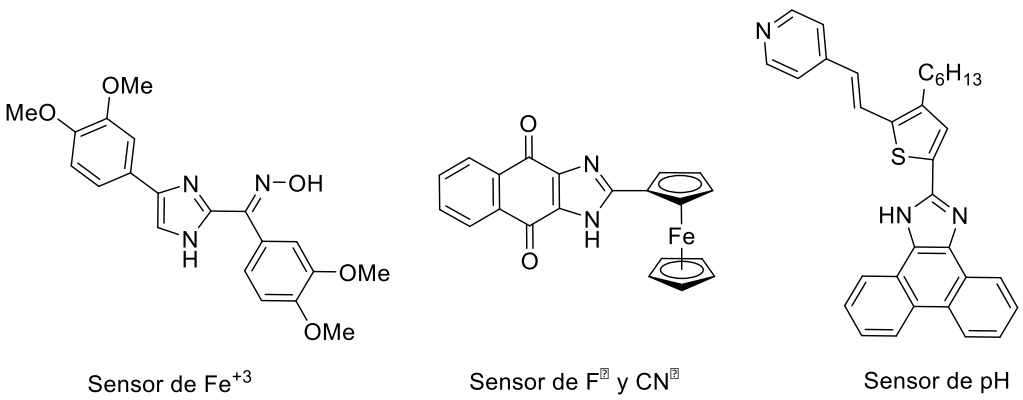


Figura 2. Ejemplos de imidazoles con aplicación en ciencia de materiales.

1.2 Apartado 2

Texto…

1.3 Apartado 3

Texto…

1.3.1 Apartado 3.1

Texto…

1.3.2 Apartado 3.2

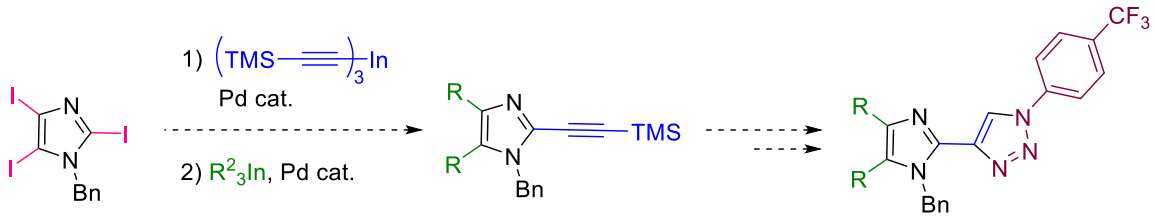
Texto…

2. Objetivos

Objetivos

Exponer de manera concisa y clara los objetivos del trabajo, es decir las metas que se desean alcanzar (no dar los resultados, sino plantearlos de forma genérica). Es conveniente insertar un esquema descriptivo. Para diferenciar del trabajo realizado utilizar líneas punteadas.

A modo de ejemplo:

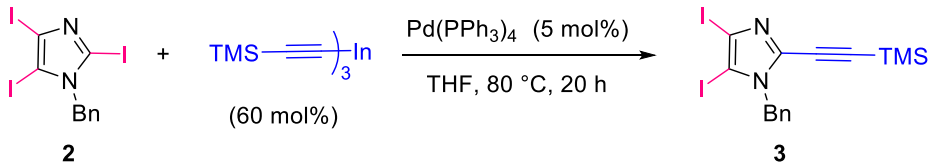


3.Resultados y discusión

En el apartado de resultados y discusión, se debe realizar un análisis detallado de los resultados obtenidos empleando un lenguaje formal y preciso. Es necesario profundizar en aspectos relacionados con la reactividad de cada compuesto en cuestión, para justificar los resultados obtenidos y compararlos con los descritos en la bibliografía mediante otras metodologías sintéticas. Se aconseja numerar los compuestos descritos, que pueden ser también nombrados de acuerdo con las normas de nomenclatura IUPAC (estilo ACS) o utilizando un nombre común o abreviado que los identifique de manera correcta En esta sección se deben emplear tablas (formato Word), esquemas (formato ChemDraw), etc originales a medida que se describen los resultados con el título al pie de la gráfica, tabla o esquema.

A modo de ejemplo:

Se hizo reaccionar el 1-bencil-2,4,5-triyodoimidazol (**2**) con un 60 mol% del triorganoíndico obtenido *in situ* a partir de etiniltrimetilsilano, mediante metalación con *n*-BuLi en THF a −78 °C y posterior transmetalación con una disolución de $InCl_3$ en THF a −78 °C. La reacción se llevó a cabo en presencia de $Pd(PPh_3)_4$ (5 mol%), y tras 20 horas a 80 ºC se obtuvo el producto de acoplamiento selectivo en la posición C2 en un rendimiento de 57% (Esquema 10). El compuesto **3** se identificó por RMN-^{1}H al observarse un singulete a δ_H 0.20 ppm correspondiente a los tres grupos metilo del silano, además de la señal del metileno a δ_H 5.30 ppm y las correspondientes señales aromáticas.



Esquema 10. Reacción de acoplamiento cruzado selectiva de **2** con tris[(trimetilsilil)etinil]indio.

De esta forma se confirmó que es posible obtener el producto de monoacoplamiento deseado en la posición C2 del anillo de imidazol con moderado rendimiento. Este resultado se justifica en base al carácter π-excedente que presenta dicho anillo. El rendimiento obtenido utilizando los organometálicos de indio es

similar a los ejemplos expuestos en la introducción en los que se llevan a cabo reacciones de acoplamiento cruzado de Stille y Suzuki sobre imidazoles.

Entrada	Cat. (mol%)	Disolvente	T(°C)	t(h)	Rto(%)[a]
1	**n**	n	n	n	n
2	**n**	n	n	n	n
3	**n**	n	n	n	n

(a) Rendimiento estimado por RMN.

Tabla 1. Resultados de la optimización de las condiciones de reacción para el sustrato **nº.**

4. Conclusiones

Conclusiones

El apartado de **conclusiones** deberá realizarse en los tres idiomas (castellano/gallego/inglés).

5. Parte experimental

5.1 Condiciones generales

En el apartado parte experimental se debe realizar un breve resumen de las técnicas empleadas (condiciones generales).

5.2 Apartado 5.2

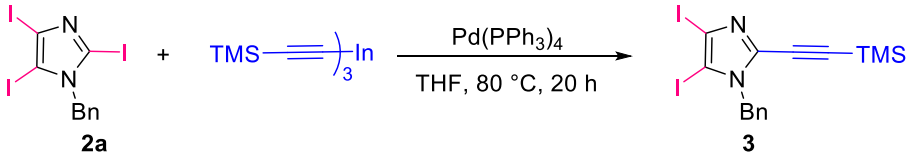
Describir la síntesis de todos los compuestos preparados además de su caracterización espectroscópica. Se comienza con el nombre IUPAC del compuesto (si está descrito indicar la referencia), síntesis detallada de cantidades empleadas y caracterización por diferentes técnicas.

A modo de ejemplo:

Procedimiento general

Sobre un matraz Schlenck previamente purgado y flameado se introdujo 1-bencil-2,4,5-triyodo-1*H*-imidazol (100 mol%), el catalizador $Pd(PPh_3)_4$ (5 mol%) y THF anhidro (0.2 M). Sobre la disolución anterior, se adicionó vía cánula la disolución del $R^1{}_3In$ (60 mol%). La mezcla se calentó a reflujo a 80 °C hasta comprobación por cromatografía en capa fina el transcurso de la reacción (20-21 horas). Se detuvo añadiendo unas gotas de metanol y el disolvente se concentró en el rotavapor. El residuo resultante se redisolvió en AcOEt (25 mL) y la fase orgánica se lavó con una disolución acuosa saturada de NaCl (2 x 10 mL). Luego se secó con $MgSO_4$ anhidro, se filtró a gravedad y se concentró a presión reducida. Finalmente, el crudo obtenido se purificó mediante cromatografía en columna de gel de sílice a presión, obteniéndose después de concentrar y secar a vacío el producto de acoplamiento cruzado selectivo.

Síntesis de 1-bencil-4,5-diyodo-2-((trimetilsilil)etinil)-1*H*-imidazol (3).



Siguiendo el procedimiento general, la reacción de tri[(trimetilsilil)etinil]indio (0.11 mL, 0.784 mmol) con 1-bencil-2,4,5-triyodoimidazol

(350.2 mg, 0.653 mmol) en presencia del catalizador $Pd(PPh_3)_4$ (45.5 mg, 0.039 mmol) en THF (8 mL) durante 20 horas a 80 °C, condujo después de la purificación por cromatografía de gel de sílice a presión (30% AcOEt/hexano) al compuesto **3**, un aceite de color amarillo (190.1 mg, 57%).

Rf (20% AcOEt/hexanos): 0.42. **RMN-^{1}H (300 MHz, $CDCl_3$)**: δ 7.30-7.34 (m, 3H), 7.21-7.24 (m, 2H), 5.30 (s, 2H), 0.20 (s, 9H) ppm. **RMN-^{13}C (75 MHz, $CDCl_3$)**: δ 136.1 (C), 135.0 (2 x C), 128.8 (2 x CH), 128.3 (CH), 127.6 (2 x CH), 102.3 (C), 96.4 (C), 92.3 (C), 52.9 (CH_2), -0.5 (3 x CH_3) ppm. **EM (IE)**: *m/z* (%) 507 [$(M+H)^+$, 17], 506 [M^+, 74], 379 [$(M-C_7H_7)^+$, 22]. **EMAR (IE)**: calculado para $C_{15}H_{16}I_2N_2Si$: 505.9167, encontrado: 505.9162.

6. Anexos

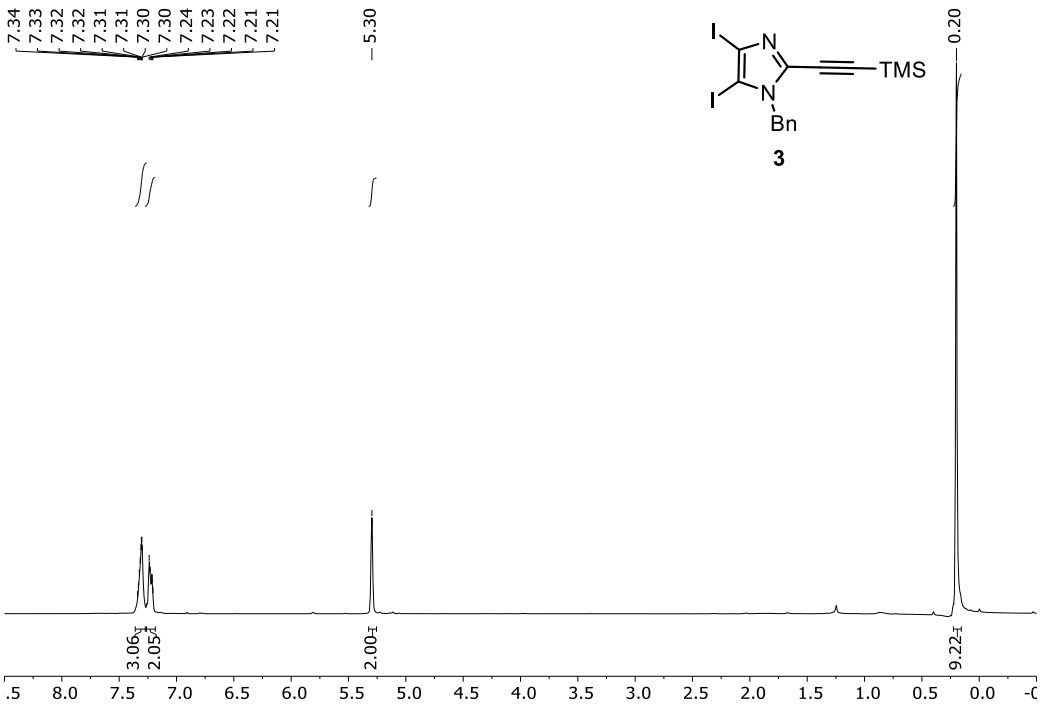
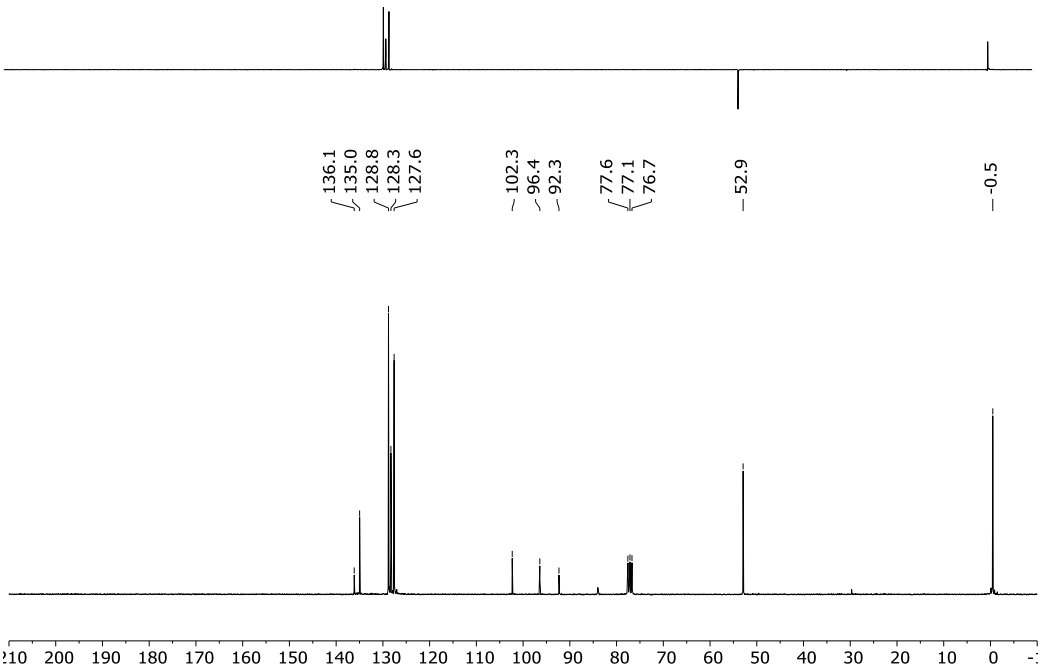
Los anexos incluyen los documentos complementarios a la caracterización espectroscópica descrita en el procedimiento experimental. En cada hoja insertar la molécula, espectro de RMN de protón y carbono 13 procesados previamente en el Mestrenova e insertados al 47% cada uno de ellos. Además, debe incluir el nombre IUPAC del compuesto y una leyenda para los espectros de RMN.

Los rangos de escala para el espectro de ^{1}H-RMN abarca desde −0.5 hasta 8.5 ppm, mientras que en 13C-RMN el rango es desde −10 hasta 210 ppm (ver Anexos Mestre Nova)

A modo de ejemplo:

1-Bencil-4,5-diyodo-2-((trimetilsilil)etinil)-1*H*-imidazol (3).

300 MHz ^{1}H NMR Espectro del compuesto **3** ($CDCl_3$, 300 K)



75 MHz ^{13}C NMR Espectro del compuesto **3** ($CDCl_3$, 300 K)