



PERSONA CIÈNCIA EMPRESA
Universitat Ramon Llull

ASSIGNATURA: SÍNTESI ORGÀNICA AVANÇADA

MATERIA: Síntesi Orgànica Avançada

MÒDUL: Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Page 1 of 8

CARACTERÍSTIQUES GENERALS*

Tipus: Formació bàsica, Obligatòria, Optativa

Treball de fi de grau, Pràctiques externes

Durada: Semestral

Semestre/s: 1

Nombre de crèdits ECTS: 4

Idioma/s: Anglès

DESCRIPCIÓ

BREU DESCRIPCIÓ I JUSTIFICACIÓ (El sentit del subjecte en relació amb els estudis. Entre 100 i 200 paraules.)

La introducció per E.J. Corey en 1967 de l'Anàlisi Retrosintètica com una metodologia sistemàtica per al disseny de síntesi orgànica, va canviar la forma en la qual els químics orgànics sintètics proposen itineraris per a una molècula donada.

Aquest curs es desenvolupa, en nou capítols, l'esmentada metodologia incloent la desconexió d'enllaços carboni-carboni (necessària per a la desconexió de sistemes monofuncionals i difuncionals), la desconexió d'enllaços carboni-heteroàtom (amb una especial atenció a la construcció de sistemes heterocíclics) i a l'estudi dels mètodes utilitzats per modificar la funcionalitat (transformació de grups funcionals i l'ús de grups protectors). Es fa especial èmfasi a les conseqüències econòmiques i ambientals de la síntesi orgànica i l'ús de les eines informàtiques per ajudar Anàlisi Retrosintètica. Finalment, el curs cobreix els mètodes de síntesi asimètrica, metodologia química combinatòria, i les seves implicacions en la preparació de nous fàrmacs.

COMPETÈNCIES (Del curs en relació amb les competències preassignades en aquesta àrea).

- **E8** - Els estudiants adquiriran el coneixement d'Anàlisi Retrosintètica, noves reaccions i metodologies sintètiques per a aplicar-los en la investigació de fàrmacs.
- **E9** - Capacitat per desenvolupar rutes sintètiques per a molècules orgàniques mitjançant l'aplicació del mètode de la "metodologia retrosintètica".
- **T1** - Capacitat per comunicar-se en anglès i l'ús d'Anglès com a idioma de treball.

* Aquestes característiques no poden ser modificats sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: SÍNTESI ORGÀNICA AVANÇADA

MATERIA: Síntesi Orgànica Avançada

MÒDUL: Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Page 2 of 8

- **T3** - Capacitat per avaluar l'impacte de l'ús de la química en el desenvolupament sostenible de la societat.
- **CB6** - Posseir i comprendre coneixements per proporcionar una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- **CB7** - Els estudiants poden aplicar els seus coneixements i capacitats adquirits a la resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relatius al seu camp d'estudi.
- **CB9** - Els estudiants són capaços de comunicar les seves conclusions a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- **CB10** - Els estudiants posseeixen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una manera que pugui ser en gran mesura autodirigida o autònoma.

REQUISITS PREVIS * (Mòduls, matèries, assignatures o coneixements necessaris per a seguir el curs. Els subjectes es poden indicar que hauria d'haver estat completat.)

Els corresponents per a accedir a estudis de màster. Els estudiants que hagin accedit al màster a partir de títols de grau o títols en química no requereixen cap complement formatiu. Per a altres títols, ha d'haver cursat els complement formatius corresponents.

CONTINGUT (Seccions que componen el pla d'estudis, a un segon nivell de detall).

Capítol 1: Introducció a la síntesi orgànica

1.1 Antecedents històrics. 1.2. Síntesi orgànica: La ciència i l'art. 1.3. Anàlisi Retrosintètica. 1.4. Objectius de la síntesi orgànica.

Capítol 2: Anàlisi Retrosintètica

2.1. Metodologia d'anàlisi retrosintètica. 2.2. Transformacions retrosintètiques. 2.3. Estratègies d'anàlisi retrosintètica. 2.4. Monofuncionals i difuncionals sistemes. 2.5 Anàlisi Retrosintètica. 2.6. En l'anàlisi retrosintètica *in silico*.

Capítol 3: Estratègies i tàctiques en la síntesi orgànica

3.1. Criteris generals per a l'avaluació d'una síntesi. 3.2. Convergent vs síntesi lineal. 3.3. El rendiment i la conversió. 3.4. La selectivitat i especificitat. 3.5. Eficiència ambiental. 3.6 Bibliografia en la síntesi orgànica. 3.7. Materials de partida genèrics. 3.8. Tàctiques per a la síntesi de compostos.

* Aquestes característiques no poden ser modificats sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: SÍNTESI ORGÀNICA AVANÇADA

MATERIA: Síntesi Orgànica Avançada

MÒDUL: Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Page 3 of 8

Capítol 4: Protecció dels grups en la síntesi orgànica

4.1. Estratègies de síntesi: la protecció dels grups. 4.2. Grups protectors d'alcohol. 4.3. Grups protectors d'amina. 4.4. Carbonil grups protectors. 4.5. Els grups protectors d'àcids carboxílic. 4.6. Grups protectors ortogonals. 4.7 Resum dels grups de protecció.

Capítol 5: transformació de grups funcionals

5.1. Les transformacions de grups funcionals. 5.2 Transformacions de Csp^3 . 5.3. Transformacions en Csp^2 i Csp . 5.4. Transformacions en nuclis aromàtics. 5.5. Transformacions de grups polars.

Capítol 6: Construcció de compostos de cadena oberta

6.1. Introducció: Els compostos de cadena oberta. 6.2 Sintons i els seus equivalents sintètics. 6.3 Les desconnexions en sistemes no funcionals i monofuncionals. 6.4. desconnexions sistemes difuncional.

Capítol 7: Construcció de compostos carbocíclics i heterocíclics

7.1. Estratègies per a la síntesi de carbocicles i heterocicles. 7.2. Desconnexions de carbocicles. Anells de 3 membres. 7.3. Desconnexions de carbocicles. Anells de 4 membres. 7.4. Desconnexions de carbocicles. 5 i els anells de 6 membres. 7.5. Desconnexions de policicles. 7.6. La desconneció d'heterocicles. Anells de 3 membres. 7.7 Les desconnexions d'heterocicles. 4 membres anells. 7.8. Desconnexions d'heterocicles. Anells de 5 i 6 membres.

Capítol 8: Síntesi asimètrica

8.1. Principis de la síntesi asimètrica. 8.2. Tipus d'inducció asimètrica. 8.3. reaccions asimètriques clàssiques. 8.4. A més dels compostos carbonil. 8.5. Les substitucions en α -carbonil. 8.6. Condensació aldòlica. 8.7. Addicions a dobles enllaços. 8.8 Oxidació i reducció.

Capítol 9: Tècniques Avançades i aplicacions en síntesi

9.1. La síntesi en fase heterogènia. 9.2. Síntesi combinatòria. 9.3 Microones en la síntesi. 9.4. Química supramolecular.

* Aquestes característiques no poden ser modificats sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: SÍNTESI ORGÀNICA AVANÇADA

MATERIA: Síntesi Orgànica Avançada

MÒDUL: Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Page 4 of 8

METODOLOGÍA

ACTIVITATS FORMATIVES * (Completar la tabla relacionant activitats, càrrega de treball, en crèdits ECTS, y competències.)

Les activitats de formació	Horas / Crèdits ECTS	Competències
Sessions d'exposició de conceptes	31 / 1.15	E8, E9, T1, T3, CB6, CB7
Sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos	4 / 0.15	E8, E9, T1, T3, CB7
Seminaris	2 / 0.07	E8, E9, T1, T3, CB7, CB9
Presentacions	1 / 0.04	E8, E9, T1, T3, CB9, T1
Activitats d'estudi personal pels estudiants	66 / 2.44	E8, E9, T1, T3, CB6, CB7, CB9, CB10
Activitats d'avaluació (proves, controls de seguiment ...)	4 / 0.15	E8, E9, T1, T3, CB9
total	108 / 4.0	

EXPLICACIÓ DE LA METODOLOGIA (justificant els mètodes didàctics utilitzats en relació a les competències i els continguts de l'assignatura. Entre 100 i 200 paraules.)

El curs consta d'unes 40-45 hores de conferències. Tot el material utilitzat durant les conferències serà lliurat a l'estudiant. La presentació dels temes que es complementarà amb la discussió i resolució de problemes i casos pràctics.

Els alumnes prepararan una presentació sobre els continguts del capítol 5. A més, es proposaran dos exercicis sintètics (capítols 6 i 7). L'examen final consisteix en resoldre de 3 a 4 problemes sintètics.

Els curs consta de:

- **Sessions d'exposició de conceptes:** Exposició de continguts mitjançant presentació o explicació (possiblement incloent demostracions) per un professor.
- **Sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos:** resolució d'exercicis, resolució d'aproximació / problema i presentació / discussió dels casos per un professor amb la participació activa dels estudiants.

* Aquestes característiques no poden ser modificats sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: SÍNTESI ORGÀNICA AVANÇADA

MATERIA: Síntesi Orgànica Avançada

MÒDUL: Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Page 5 of 8

- **Seminaris:** discussió oberta amb el professor per tal de revisar, discutir i respondre a preguntes sobre els materials i temes presentats en les sessions de sessions d'exposició de conceptes i resolució d'exercicis, problemes i casos.
- **Presentacions:** Presentació oral a un mestre i possiblement altres estudiants per un estudiant. Pot ser un document preparat per l'alumne mitjançant la recerca en la literatura publicada o un resum d'un projecte pràctic o realitzades per l'estudiant.
- **Activitats d'estudi personal pels estudiants:** El treball personal requerit a l'estudiant per tal que adquireixi les habilitats de l'assignatura i assimilar els coneixements presentats en les sessions de sessions d'exposició de conceptes i resolució d'exercicis, problemes i casos, usant, si es necessari, el material complementari recomanat.
- **Activitats d'avaluació (proves, controls de monitorització ...):** Les declaracions orals i / o escrits realitzats durant el curs d'un semestre o després d'ella.

AVALUACIÓ

MÈTODES D'AVALUACIÓ * (Completar la taula relacionant mètodes d'avaluació, competències i pes en la qualificació de l'assignatura.)

Mètodes d'avaluació	pes	competències
Examen final	40%	E8, E9, T1, T3 / CB6, CB7
Seguiment dels exàmens	30%	E8, E9, T1, T3 / CB6, CB7
Presentació de projectes	25%	E8, E9, T1, T3 / CB9, CB10
Participació	5%	T1

RESULTATS D'APRENTATGE (Explicació de les realitzacions de l'alumne que permeten l'avaluació de competències, relacionant-los amb les competències i els mètodes d'avaluació.)

Objectiu 1:

Els estudiants han de demostrar les seves habilitats per aplicar l'anàlisi retrosintètica a la desconexió de sistemes monofuncionals i difuncionals.

Objectiu 2:

Els estudiants han de demostrar la seva capacitat per interpretar els resultats.

Objectiu 3:

Els estudiants han de demostrar el seu coneixement de noves reaccions i metodologies sintètiques, com els mètodes de síntesi asimètrica, protecció de grups funcionals, etc., per

* Aquestes característiques no poden ser modificats sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: SÍNTESI ORGÀNICA AVANÇADA

MATERIA: Síntesi Orgànica Avançada

MÒDUL: Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Page 6 of 8

fer front a / resoldre / discutir qüestions teòriques o pràctiques a la llum dels principis de la síntesi orgànica.

Objectiu 4:

Els estudiants hauran de demostrar habilitats per desenvolupar itineraris sintètics per a molècules orgàniques mitjançant l'ús de la metodologia del "pas enrere".

Objectiu 5:

Els estudiants han de demostrar el seu coneixement sobre les implicacions econòmiques i ambientals en els processos de síntesi, tant en els proposats pels mateixos alumnes i en els que s'analitzen a l'aula.

QUALIFICACIÓ (Explicació del sistema utilitzat per al grau de l'estudiant.)

La qualificació d'aquest curs depèn dels següents elements:

Examen final	40%
Seguiment dels exàmens	30%
Documents i presentacions	25%
Participació	5%

La nota final (1^a convocatòria) es calcula utilitzant els resultats de l'**examen final** (EF), la mitjana dels resultats de les **proves de seguiment** (AS), la nota de la **presentació del capítol V** i un **mapa de transformacions sintètiques** (T) i la **participació a classe** (P):

$$\text{Nota Final} = 40\% \text{ EF} + 30\% \text{ AS} + 25\% \text{ T} + 5\% \text{ P}$$

La nota final a les següents convocatòries ve donada per:

$$\text{Nota Final} = 90\% \text{ EF} + 10\% \text{ T (nota mapa de Transf. sintètiques)}$$

* Aquestes característiques no poden ser modificats sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: SÍNTESI ORGÀNICA AVANÇADA

MATERIA: Síntesi Orgànica Avançada

MÒDUL: Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Page 7 of 8

AVALUACIÓ DE LES COMPETÈNCIES (Definir expressions de càlcul per a cada un de les activitats d'avaluació basades en la competència en qüestió.)

competències	Mètodes d'avaluació	observacions
Posseir i comprendre coneixements per proporcionar una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca (CB6).	Examen final Activitats de seguiment	50% EF + 50% AS
Els estudiants poden aplicar els seus coneixements i capacitats adquirits a la resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relatius al seu camp d'estudi (CB7).	Examen final Activitats de seguiment	50% + 50% EFE AS
Els estudiants poden comunicar les seves conclusions i els coneixements i raons últimes que les sustenten, a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats (CB9).	Presentació de projectes	T
Que els alumnes tinguin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant d'una manera que pugui ser en gran mesura autodirigit o autònom (CB10)	Presentació de projectes	T
Capacitat de comunicar-se eficaçment tant de forma oral i per escrit amb socis especialitzats i públic no especialitzat (T1)	Presentació de projectes Participació	95% T + 5% P
Capacitat per avaluar l'impacte de l'ús de la química en el desenvolupament sostenible de la societat (T3)	Presentació de projectes Participació	95% T + 5% P
Els estudiants adquiriran el coneixement d'Anàlisi Retrosintètica, noves reaccions i metodologies sintètiques per a aplicar-los en la investigació de fàrmacs (E8)	Examen final Activitats de seguiment	50% + 50% EFE AS
Capacitat per desenvolupar rutes sintètiques per a molècules orgàniques mitjançant l'aplicació del mètode de la "metodologia retrosintètica" (E9)	Examen final Activitats de seguiment	50% + 50% EFE AS

* Aquestes característiques no poden ser modificats sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: SÍNTESI ORGÀNICA AVANÇADA

MATERIA: Síntesi Orgànica Avançada

MÒDUL: Recerca de Fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Page 8 of 8

BIBLIOGRAFIA (Recomanada i accessible als estudiants.)

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA (*):

- Apunts de l'assignatura (disponible a Blackboard, <http://moodle.iqs.url.com>)
- J. I. Borrell, J. Teixidó, J. L. Falcó, Síntesis Orgánica, ed. Síntesis, Madrid, 1999.
- J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, *Organic Chemistry* (2nd edition), Oxford University Press, Oxford, 2012.
- D. Sanchez-García, J. Teixidó, J.I. Borrell, L. Ros, Metales de Transición en Síntesis Orgánica, Ed. Síntesis, Madrid, 2013.
- G. Procter, *Asymmetric Synthesis*, Oxford University Press, Oxford 1996.

BIBLIOGRAFÍA o MATERIAL COMPLEMENTARI:

- G. L. Patrick. An introduction to Medicinal Chemistry Oxford University Press, Oxford, 1995.
- M. B. Smith. *Organic Synthesis*, Mc Graw-Hill, New York, 1994.
- S. Warren, *Organic Synthesis. The Disconnection Approach*, John Wiley & Sons, Chichester, 1982.
- S. Warren, *Workbook for Organic Synthesis. The Disconnection Approach*, John Wiley & Sons, Chichester, 1982.
- R. K. Mackie, D. M. Smith. *Guidebook to Organic Synthesis*, Longman, London 1983.
- J. March, *Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanisms, and Structure*, John Wiley & Sons, 4th ed., New York, 1992.
- E. J. Corey, X.-M. Cheng. *The Logic of Chemical Synthesis*, Wiley Interscience, New York, 1989.

HISTÒRIC DEL DOCUMENT

CANVIS ANTERIORS (Indicar data i autor / s, més recent primer)

30 de setembre de 2014. Dr. David Sánchez García

5 de setembre de 2016. Dr. David Sánchez García

18 d'octubre de 2017. Dr. David Sánchez García

ACTUALITZAT (Indicar data i autor / s.)

19 de juliol de 2018. Dr. David Sánchez García

* Aquestes característiques no poden ser modificats sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).