



PERSONA CIENCIA EMPRESA
Universitat Ramon Llull

ASIGNATURA: SÍNTESIS ORGÁNICA AVANZADA

MATERIA: Síntesis Orgánica Avanzada

MODULO: Investigación de Fármacos

ESTUDIOS: Master en Química Farmacéutica

Página 1 of 8

CARACTERÍSTICAS GENERALES*

Tipo: Formación básica, Obligatoria, Optativa

Trabajo de fin de grado, Prácticas externas

Duración: Semestral

Semestre: 1

Número de créditos ECTS: 4

Idioma: Inglés

DESCRIPCIÓN

BREVE DESCRIPCIÓN Y JUSTIFICACIÓN (del sentido de la asignatura en relación a los estudios. Entre 100 y 200 palabras.)

La introducción por E.J. Corey en 1967 de Análisis Retrosintético como una metodología sistemática para el diseño de síntesis orgánica definitivamente cambió la forma en la que los químicos orgánicos sintéticos proponen itinerarios para una molécula dada.

Este curso se desarrolla en nueve capítulos de la citada metodología incluyendo la desconexión de enlaces carbono-carbono (necesario para la desconexión de sistemas monofuncionales y difuncionales), la desconexión de enlaces carbono-heteroátomo (viviendo una especial atención a la construcción de sistemas heterocíclicos) y el estudio de los métodos utilizados para modificar los grupos funcionales (transformación de grupos funcionales y el uso de grupos protectores). Se presta una especial atención a las consecuencias económicas y ambientales de la síntesis orgánica y al uso de las herramientas informáticas para ayudar Análisis Retrosintético. Por último, el curso cubre los métodos de síntesis asimétrica, metodología química combinatoria, y sus implicaciones en la preparación de nuevos fármacos.

COMPETENCIAS (de la asignatura puestas en relación con las competencias preasignadas en la materia).

- **E8** - Los estudiantes adquirirán el conocimiento de Análisis Retrosintético, nuevas reacciones y metodologías sintéticas para aplicarlos en la investigación de fármacos.
- **E9** - Capacidad para desarrollar rutas sintéticas para moléculas orgánicas multifuncionales a través de la aplicación del método de la "metodología retrosintético".
- **T1** - Capacidad para comunicarse en inglés y el uso de inglés como idioma de trabajo.
- **T3** - Capacidad para evaluar el impacto del uso de la química en el desarrollo sostenible de la sociedad.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: SÍNTESIS ORGÁNICA AVANZADA

MATERIA: Síntesis Orgánica Avanzada

MODULO: Investigación de Fármacos

ESTUDIOS: Master en Química Farmacéutica

Página 2 of 8

- **CB6** - Poseer y comprender conocimientos para proporcionar una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y / o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- **CB7** - Los estudiantes pueden aplicar sus conocimientos y capacidades adquiridos a la resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- **CB9** - Los estudiantes son capaces de comunicar sus conclusiones a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- **CB10** - Los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que pueda ser en gran medida autodirigido o autónomo.

REQUISITOS PREVIOS * (módulos, materias, asignaturas o conocimientos necesarios para el seguimiento de la asignatura. Se pueden hacer constar asignaturas que se deben haber cursado.)

El correspondiente para acceder a estudios de máster. Los estudiantes que hayan accedido máster a partir de títulos de grado o títulos en química no requerirán ningún suplemento de entrenamiento adicional. Para otros títulos, deben haber cursado los complementos formativos correspondientes.

CONTENIDO (como relación de los apartados que constituyen el temario de la misma, hasta un detalle de segundo nivel.)

Capítulo 1: Introducción a la síntesis orgánica

1.1 Antecedentes históricos. 1.2. Síntesis orgánica: La ciencia y el arte. 1.3. Análisis Retrosintético. 1.4. Objetivos de la síntesis orgánica.

Capítulo 2: Análisis Retrosintético

2.1. Metodología de análisis retrosintético. 2.2. Retrosintético transformaciones. 2.3. Estrategias de análisis retrosintético. 2.4. Sistemas Monofuncionales y difuncionales. 2.5. Análisis Retrosintético de Praxis. 2.6. Análisis retrosintético *in silico*.

Capítulo 3: Estrategias y tácticas en la síntesis orgánica

3.1. Criterios generales para la evaluación de una síntesis. 3.2. Convergente vs síntesis lineal. 3.3. El rendimiento y la conversión. 3.4. La selectividad y especificidad. 3.5. Eficiencia ambiental. 3.6 Bibliografía en la síntesis orgánica. 3.7. Materiales de partida genéricos. 3.8. Tácticas en síntesis de compuestos.

Capítulo 4: Protección de los grupos en la síntesis orgánica

4.1. Estrategias de síntesis: la protección de los grupos. 4.2. Grupos protectores de alcohol. 4.3. Grupos protectores de amina. 4.4. Carbonilo grupos protectores. 4.5. Los grupos

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: SÍNTESIS ORGÁNICA AVANZADA

MATERIA: Síntesis Orgánica Avanzada

MODULO: Investigación de Fármacos

ESTUDIOS: Master en Química Farmacéutica

Página 3 of 8

protectores de ácido carboxílico. 4.6. Grupos protectores ortogonales. 4.7. Resumen de los grupos de protección.

Capítulo 5: transformación de grupos funcionales

5.1. Las transformaciones de grupos funcionales. 5.2 Transformaciones de Csp^3 . 5.3. Transformaciones en Csp^2 y Csp . 5.4. Transformaciones en núcleos aromáticos. 5.5. Transformaciones de grupos polares.

Capítulo 6: Construcción de compuestos de cadena abierta

6.1. Introducción: Los compuestos de cadena abierta. 6.2 Sintones y sus equivalentes sintéticos. 6.3 Las desconexiones en sistemas no funcionales y monofuncionales. 6.4. Desconexiones de sistemas difuncional.

Capítulo 7: Construcción de compuestos carbocíclicos y heterocíclicos

7.1. Estrategias para la síntesis de carbociclos y heterociclos. 7.2 Desconexiones de carbociclos. Anillos de 3 miembros. 7.3 Desconexiones de carbociclos. Anillos de 4 miembros. 7.4. Desconexiones de carbociclos. Anillos de 5 y 6 miembros. 7.5. Desconexiones de policiclos. 7.6. Desconexión de heterociclos. Anillos de 3 miembros. 7.7. Las desconexiones de heterociclos. Anillos de 4 miembros. 7.8 Desconexiones de heterociclos. Anillos de 5 y 6 miembros

Capítulo 8: Síntesis asimétrica

8.1. Principios de la síntesis asimétrica. 8.2. Tipos de inducción asimétrica. 8.3. Reacciones asimétricas clásicas. 8.4. Además de los compuestos carbonilo. 8.5. Las sustituciones en α -carbonilo. 8.6. Condensación aldólica. 8.7. Adiciones a dobles enlaces. 8.8 Oxidación y reducción.

Capítulo 9: Técnicas Avanzadas y aplicaciones en síntesis

9.1. La síntesis en fase heterogénea. 9.2. Síntesis combinatoria. 9.3 Las microondas en la síntesis. 9.4. Química supramolecular.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: SÍNTESIS ORGÁNICA AVANZADA

MATERIA: Síntesis Orgánica Avanzada

MODULO: Investigación de Fármacos

ESTUDIOS: Master en Química Farmacéutica

Página 4 of 8

METODOLOGÍA

ACTIVIDADES FORMATIVAS * (Completar la tabla relacionando actividades, carga de trabajo, en créditos ECTS, y competencias.)

Actividades formativas	Horas / Créditos ECTS	Competencias
Sesiones de exposición de conceptos	31 / 1.15	E8, E9, T1, T3, CB6, CB7
Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos	4 / 0.15	E8, E9, T1, T3, CB7
Seminarios	2 / 0.07	E8, E9, T1, T3, CB7, CB9
Presentaciones	1 / 0.04	E8, E9, T1, T3, CB9, T1
Actividades de estudio personal por los estudiantes	66 / 2.44	E8, E9, T1, T3, CB6, CB7, CB9, CB10
Actividades de evaluación (pruebas, controles de seguimiento ...)	4 / 0.15	E8, E9, T1, T3, CB9
TOTAL	108 / 4.0	

EXPLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA (justificando los métodos didácticos usados en relación a las competencias y los contenidos de la asignatura. Entre 100 y 200 palabras.)

El curso consta de alrededor de 40-45 horas de conferencias. Todo el material utilizado durante las conferencias será entregado al estudiante. La presentación de los temas que se complementará con la discusión y resolución de problemas y casos prácticos.

Los alumnos prepararan una presentación sobre los contenidos del capítulo 5. Además, se propondrán dos ejercicios sintéticos (capítulos 6 y 7). El examen final consiste en resolver de 3 a 4 problemas sintéticos.

- **Sesiones de exposición de conceptos:** Exposición de contenidos mediante presentación o explicación (posiblemente incluyendo demostraciones) por un profesor.
- **Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos:** resolución de ejercicios, resolución de aproximación / problema y presentación / discusión de los casos por un profesor con la participación activa de los estudiantes.
- **Seminarios:** Declaración hecha por un maestro con el fin de revisar, discutir y responder a preguntas sobre los materiales y temas presentados en las sesiones de sesiones de exposición de conceptos y resolución de ejercicios, problemas y casos.

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: SÍNTESIS ORGÁNICA AVANZADA

MATERIA: Síntesis Orgánica Avanzada

MODULO: Investigación de Fármacos

ESTUDIOS: Master en Química Farmacéutica

Página 5 of 8

- **Presentaciones:** Presentación oral a un maestro y posiblemente otros estudiantes por un estudiante. Puede ser un documento preparado por el alumno mediante la búsqueda en la literatura publicada o un resumen de un proyecto práctico o realizadas por el estudiante.
- **Actividades de estudio personal por los estudiantes:** El trabajo personal requerido del estudiante a adquirir las habilidades de cada sujeto y asimilan los conocimientos presentados en las sesiones de sesiones de exposición de conceptos y resolución de ejercicios, problemas y casos, el uso, el material cuando sea necesario, la consulta se recomendó.
- **Actividades de evaluación (pruebas, controles de seguimiento...):** Las declaraciones orales y / o escritos realizados durante el curso de un semestre o después de ella.

EVALUATION

MÉTODOS DE EVALUACIÓN * (Completar la tabla relacionando métodos de evaluación, competencias y peso en la calificación de la asignatura.)

Métodos de evaluación	Peso	competencias
Examen final	40%	E8, E9, T1, T3 / CB6, CB7
Seguimiento de los exámenes	30%	E8, E9, T1, T3 / CB6, CB7
Y presentación de proyectos	25%	E8, E9, T1, T3 / CB9, CB10
Participación	5%	T1

LOS RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (Explicación de las realizaciones del alumno que permiten la evaluación de competencias, relacionándolos con las competencias y los métodos de evaluación.)

Objetivo 1:

Los estudiantes deben demostrar sus habilidades para aplicar el análisis retrosintético a la desconexión de sistemas monofuncionales y difuncionales.

Objetivo 2:

Los estudiantes deben demostrar su capacidad para interpretar los resultados.

Objetivo 3:

Los estudiantes deben demostrar su conocimiento de nuevas reacciones y metodologías sintéticas, como los métodos de síntesis asimétrica, protección de grupos funcionales, etc., para hacer frente a / resolver / discutir cuestiones teóricas o prácticas a la luz de los principios de la síntesis orgánica.

Objetivo 4:

Los estudiantes deben demostrar habilidades para desarrollar itinerarios sintéticos para moléculas orgánicas multifuncionales mediante el uso de la metodología del "paso atrás".

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: SÍNTESIS ORGÁNICA AVANZADA

MATERIA: Síntesis Orgánica Avanzada

MODULO: Investigación de Fármacos

ESTUDIOS: Master en Química Farmacéutica

Página 6 of 8

Objetivo 5:

Los estudiantes deben demostrar su conocimiento sobre las implicaciones económicas y ambientales en los procesos de síntesis, tanto en los propuestos por los propios alumnos y en los que se analizan en el aula.

CALIFICACIÓN (Explicación del sistema utilizado para el grado del estudiante.)

La calificación de este curso depende de los siguientes elementos:

Examen final	40%
Seguimiento de los exámenes	30%
Documentos y presentaciones	25%
Participación	5%

La nota final (1ª convocatoria) se calcula utilizando los resultados del **examen final** (EF), la media de los resultados de las **pruebas de seguimiento** (AS), la nota de la **presentación del capítulo V** y un **mapa de transformaciones sintéticas** (T) y la **participación en clase** (P):

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

La nota final en las siguientes convocatorias viene dada por:

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

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: SÍNTESIS ORGÁNICA AVANZADA

MATERIA: Síntesis Orgánica Avanzada

MODULO: Investigación de Fármacos

ESTUDIOS: Master en Química Farmacéutica

Página 7 of 8

EVALUACIÓN DE LA COMPETENCIA (Definir expresiones de cálculo para cada uno de las actividades de evaluación basadas en la competencia en cuestión.)

competencias	Métodos de evaluación	observaciones
Poseer y comprender conocimientos para proporcionar una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y / o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación (CB6).	Examen final Seguir	50% EF + 50% AS
Los estudiantes pueden aplicar sus conocimientos y capacidades adquiridos a la resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio (CB7).	Examen final Seguir	50% + 50% EFE AS
Los estudiantes pueden comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan, a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades (CB9).	Y presentación de proyectos	T
Que los alumnos tengan las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que pueda ser en gran medida autodirigido o autónomo (CB10)	Y presentación de proyectos	T
Capacidad de comunicarse eficazmente tanto de forma oral y por escrito con socios especializados y público no especializado (T1)	Presentación de proyectos Participación	95% T + 5% P
Capacidad para evaluar el impacto del uso de la química en el desarrollo sostenible de la sociedad (T3)	Presentación de proyectos Participación	95% T + 5% P
Los estudiantes adquirirán el conocimiento de Análisis Retrosintético, nuevas reacciones y metodologías sintéticas para aplicarlos en la investigación de fármacos (E8)	Examen final Actividades de seguimiento	50% + 50% EFE AS
Capacidad para desarrollar rutas sintéticas para moléculas orgánicas multifuncionales a través de la aplicación del método de la "metodología retrosintético" (E9)	Examen final Actividades de seguimiento	50% + 50% EFE AS

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

ASIGNATURA: SÍNTESIS ORGÁNICA AVANZADA

MATERIA: Síntesis Orgánica Avanzada

MODULO: Investigación de Fármacos

ESTUDIOS: Master en Química Farmacéutica

Página 8 of 8

BIBLIOGRAFIA (Recomendada y accesible a los estudiantes)

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA (*):

- Apuntes de la asignatura (disponible en 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.

MATERIAL COMPLEMENTARIO:

- 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.

HISTORIA DEL DOCUMENTO

CAMBIOS ANTERIORES (Indicar fecha y autor / s, más reciente primero)

5 de octubre de 2017. Dr. David Sánchez García

30 de septiembre de 2014. Dr. David Sánchez García

18 de octubre de 2017. Dr. David Sánchez García

ACTUALIZADO (Indicar fecha y autor / s.)

19 de julio de 2018. Dr. David Sánchez García

* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).