



## **Síntesi Orgànica Avançada**

### **1. Introducció**

Síntesi orgànica: ciència i art. Perspectives històriques. Objectius de la síntesi orgànica.

### **2. Plantejament de síntesis orgàniques**

Síntesis totals i parcials. Síntesis lineals i convergents. Conceptes generals. Conversió, selectivitat i rendiment. Regioselectivitat, estereoselectivitat i estereoespecificitat.

### **3. Metodologia en l'elaboració d'un pla de síntesi**

Principis generals en el disseny d'una síntesi. Introducció a l'anàlisi retrosintètica. Conceptes de desconexió, sintó, precursor i intermedi. Arbre de síntesi. Anàlisi estructural i generació de precursors.

### **4. Desconnexió de compostos aromàtics**

Principis bàsics. Desconnexió d'enllaços  $C_{\text{aromàtic}}-C$ ,  $C_{\text{aromàtic}}-\text{heteroàtom}$  (N, S, O i halògens). Estratègies de síntesi.

### **5. Desconnexió en base a un grup funcional. Interconversió de grups funcionals**

Desconnexió d'amines, alcohols, èters, tioèters, halurs d'alquil, alquens, aldehids i cetones, àcids carboxílics i derivats, alquens. Us d'acetilens. Estratègia general. Elecció de la desconexió.

### **6. Quimioselectivitat i protecció de grups funcionals**

Reactivitat de diferents grups funcionals. Característiques d'un grup protector. Protecció d'alcohols: èters, esters. Protecció de diols. Protecció del grup carbonil: acetals, ditioacetals. Protecció del grup carboxil: esters. Protecció d'amines: carbamats.

### **7. Desconnexió en base a dos grups funcionals**

Compostos difuncionalitzats. Desconnexions lògiques en compostos 1,1-difuncionalitzats, 1,3-difuncionalitzats i 1,5-difuncionalitzats. Desconnexions il·lògiques en compostos 1,2-difuncionalitzats, 1,4-difuncionalitzats i 1,6-difuncionalitzats. Concepte de dissonància. Inversió de reactivitat: processos més freqüents.

### **8. Desconnexió de sistemes cíclics**

Anells de tres, quatre, cinc i sis membres.

### **9. Desconnexió d'heterocicles**

Consideracions generals. Reaccions de ciclació intramolecular: ciclacions nucleòfil-electròfil i ciclacions radicalàries. Reaccions electrocícliques intra- e inter-moleculars: ciclacions dipolars, reaccions hetero-Diels-Alder i ciclacions [2+2].

### **10. Introducció a la síntesi asimètrica**

Puresa òptica i excés enantiomèric. Resolució de racèmics: mètodes clàssics i mètodes quimioenzimàtics. Concepte d'inducció asimètrica. Precursors, auxiliars i catalitzadors quirals. Exemples. Tendències en síntesi orgànica. Química Combinatòria.

### **Bibliografia:**

- J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, *Organic Chemistry*, Oxford University Press, 2005.
- (o altres llibres de Química Orgànica General)
- S. Warren, *Organic Synthesis: The Disconnection Approach*, John Wiley & Sons, 1982.
- M.B. Smith *Organic Synthesis*, McGraw-Hill, 2002.
- T. Greene, P. G. M. Wuts, *Protective Groups in Organic Synthesis*, John Wiley & Sons, 2nd Ed., 1991.
- Referències primàries.

**Consultes a la Professora:** Horari a convenir

**Més informació a:** Campus virtual 2008/Síntesi Orgànica Avançada (20609)

## **Objectiu de l'assignatura**

Els químics industrials sintetitzen fàrmacs, polímers, pesticides, tints, colorants i aromes alimentaris, perfums, detergents i desinfectants. Els investigadors sintetitzen productes naturals d'estructura incerta, compostos per estudis mecanístics, possibles intermedis de processos químics i biològics, mils de fàrmacs potencials per cadascun que s'arriba a utilitzar en la pràctica mèdica i inclús compostos útils com a precursors d'altres. La finalitat d'aquest curs es aprendre com es planteja la síntesi d'un compost orgànic. Aquest aprenentatge es basa en el *mètode de la desconexió*. Es tracta d'una aproximació analítica, on es comença per la molècula objectiu (target) i, mitjançant desconnexions d'enllaços, s'arriba a possibles materials de partida.

## **Requisits**

Per seguir aquest curs cal tenir coneixements bàsics de Química Orgànica. Per repassar les reaccions i els seus mecanismes, el millor és consultar un llibre de Química Orgànica General. És essencial treballar els problemes per poder valorar la pròpia capacitat.

## **Avaluació**

L'avaluació final tindrà en compte els següents factors:

- Participació activa a les classes de teoria
- Participació activa a les classes de problemes
- Examen al final del semestre (75%)
- Preparació i defensa d'un treball bibliogràfic assignat (15%)