



# INSTITUTIONEN FÖR KEMI OCH MOLEKYLÄRBIOLOGI

## NFKE321, Avancerad syntesplanering, 7,5 högskolepoäng

Advanced synthesis planning, 7.5 credits

*Forskarnivå / Third-cycle level*

---

### Fastställande

Kursplanen är fastställd av Institutionen för kemi och molekylärbiologi 2024-10-10 att gälla från och med vårterminen 2025.

### *Ansvarig institution*

Institutionen för kemi och molekylärbiologi, Naturvetenskapliga fakulteten

### Förkunskapskrav

Kursdeltagarna ska ha förmåga att läsa och skriva kemiska strukturer hos organiska molekyler. Vidare krävs en allmän förståelse för kemisk reaktivitet och syntetisk metodik för att konstruera vanliga kemiska funktionaliteter för att följa kursinnehållet.

### Lärandemål

Kursen syftar till att utveckla studentens förmåga att planera, leda och genomföra forskning där komplex flerstegssyntes är en central komponent. Specifikt syftar kursen till att stärka studentens förmåga att analysera struktur, reaktivitet och mekanism för att utveckla tillförlitliga och/eller innovativa vägar till definierade molekylära mål. Tonvikten läggs på att lära sig att kritiskt utvärdera syntetiska vägar avseende effektivitet, skalbarhet och hållbarhet.

### *Kunskap och förståelse*

- Definiera elementen i retrosyntetisk analys och beskriv hur den används som ett tänkande verktyg i syntesplanering.
- Redogöra för vanliga mätetal (ekonomier) för syntes och grön kemiprinciper.

### *Färdighet och förmåga*

- Utveckla syntetiska planer för komplexa mål, inklusive beredskapsalternativ för kritiska steg.
- Tillämpa mekanistiskt resonemang, stereo-elektroniska effekter och konformationsanalys för

att stödja syntesplanering.

- Motivera förutsägelser av kemo-, stereo- och regioselektiviteter i komplexa miljöer.

### ***Värderingsförmåga och förhållningssätt***

- Kritiskt bedöma lönsamhet och identifiera styrkor och svagheter i en föreslagen syntetisk plan.
- Utvärdera en föreslagen syntes i termer av hållbarhet och skalbarhet.

Kursen är hållbarhetsfokuserad, vilket innebär att minst ett av kursens lärandemål tydligt visar att kursens innehåll uppfyller minst ett av Göteborgs universitets fastställda kriterier för hållbarhetsmärkning. Detta innehåll utgör även kursens huvudsakliga fokus.

## **Innehåll**

Delkurs 1: Teori, övningar och individuellt projektarbete, 3,5 hp (ca 89 timmar)

Betygsskala: Godkänd (G) och Underkänd (U)

Föreläsningar med övningar (3 timmar vardera, totalt 9 timmar)

Föreläsning 1: Förklaring av kursinnehåll och moduler; naturliga produkter som källa för nya läkemedel; definition av organisk syntes och dess motivation; historiskt perspektiv på syntesdesign; terminologi för retrosyntes; bedömning av molekylär komplexitet; introduktion till den retrosyntetiska transformationen och relaterad retron.

Föreläsning 2: Retrosyntetiska strategier med fokus på funktionella gruppbaseade strategier, topologiska strategier och strukturella målbaserade strategier.

Föreläsning 3: Retrosyntetiska strategier med fokus på transformationsbaserade och biomimetiska strategier; taktik i syntes och allmänna riktlinjer för fränkopplingsmetoder med hänsyn till linjäritet, symmetri och labila funktionaliteter; Syntesidealitet med tanke på stegekonomi, atomekonomi, redoxekonomi och principerna för grön kemi.

Individuellt projektarbete: Varje deltagande student ska uppfylla följande uppgifter för en given målmolekyl. (8 timmars närvaro och 72 timmars förberedelse utanför klassen)

Uppgift 1: Beskrivning av den molekylära komplexiteten och identifiering av den syntetiska utmaningen. Presentation och diskussion inför kursen.

Uppgift 2: Genomförande av en retrosyntetisk analys med en första retrosyntetisk målmolekyl. Presentation och diskussion inför kursen.

Uppgift 3: Genomförande av en andra retrosyntetisk analys och utveckling av ett retrosyntetiskt träd för den individuella målmolekylen. Presentation och diskussion inför kursen.

Uppgift 4: Utveckling av en syntetisk plan med beaktande av strategier, taktik och aspekter av syntesidealitet och hållbarhet. Presentation och diskussion inför kursen.

Delkurs 2: Grupparbete, 4 hp (ca 100 timmar)

Betygsskala: Godkänd (G) och Underkänd (U)

Grupparbete: Först kommer studenterna att arbeta tillsammans med den retrosyntetiska analysen av målmolekylen i Nordic Retrosynthesis Challenge inom en given deadline på 3 dagar och tillhandahålla en retrosyntetisk plan. För det andra kommer studenterna att arbeta

tillsammans i en grupp för att utveckla en framåtriktad syntesplan inklusive en motivering av varje syntessteg under beaktande av aspekter av kemo-, stereo- och regioselektivitet, mekanism, hållbarhet och skalbarhet.

Uppdrag 5: Utveckling av en retrosyntetisk plan. Presentation och diskussion inför kursen.

Uppdrag 6: Utveckling av en syntetisk plan inklusive motivering. Presentation och diskussion inför kursen.

## Undervisningsformer

Delkurs 1: Undervisningen består av 3 föreläsningar om retrosynteskoncept, totalsyntesstrategier och taktik för konstruktion av komplexa målmolekyler, syntesekonomier och principerna för grön hållbar kemi kompletterat med mindre fördjupade gruppövningar och ett individuellt projektarbete i medföljande och heltäckande koppla samman alla aspekter av kursen. Projektarbetet kommer att presenteras av studenterna under modul 1.

Modul 2: Den andra modulen är inbäddad i Nordic Retrosynthesis Challenge som arrangeras av Svenska Kemisamfundet. I den första fasen kommer eleverna att förses med en komplex målmolekyl och ska föreslå en retrosyntetisk plan som arbetar tillsammans i en grupp under tidsbegränsningar (3 dagar) och tillämpar de lärda principerna från Modul 1. I den andra fasen kommer eleverna att arbeta tillsammans i en grupp för att ta fram en syntetisk plan inklusive en motivering med hänsyn till mekanistiska resonemang, stereo-elektroniska effekter och konformationsanalys. Syntesplanen kommer att presenteras inför ett plenum och diskuteras i slutet av modul 2.

### *Undervisningsspråk*

Kursen ges på svenska men kan ges på engelska vid behov

Kursen ges som huvudregel på svenska men kan ges helt eller delvis på engelska om omständigheterna kräver det (t.ex. deltagarna är inte flytande i svenska).

## Betyg

På kursen ges något av betygen Godkänd (G) och Underkänd (U).

Betygsskalan består av: Godkänd (G) och Underkänd (U). För betyget Godkänd (G) på kursen krävs godkända resultat på delkurs 1 och 2.

Beträffande tillämpning av ECTS betygsskalan se rektors beslut 2007-05-28, dnr G 8 197/07.

## Former för bedömning

Lärandemålen kommer att bedömas genom 6 uppgifter som studenterna måste genomföra under kursen:

Uppgift 1: Beskrivning av den molekylära komplexiteten och identifiering av den syntetiska utmaningen. Presentation och diskussion inför kursen.

Uppgift 2: Genomförande av en retrosyntetisk analys med en första retrosyntetisk målmolekyl. Presentation och diskussion inför kursen.

Uppgift 3: Genomförande av en andra retrosyntetisk analys och utveckling av ett retrosyntetiskt träd för den individuella målmolekylen. Presentation och diskussion inför kursen.

Uppgift 4: Utveckling av en syntetisk plan med beaktande av strategier, taktik och aspekter av syntesidealitet och hållbarhet. Presentation och diskussion inför kursen.

Uppgift 5: Utveckling av en retrosyntetisk plan som en del av ett grupparbete under tidsbegränsning. Presentation och diskussion inför kursen.

Uppgift 6: Utveckling av en sammanfattande plan inklusive motivering som en del av ett grupparbete under tidsbegränsning. Presentation och diskussion inför kursen.

## Kursvärdering

En kursvärdering görs i förhållande till kursens tänkta lärandemål och innehåll. Den utförs i slutet av kursen genom en individuell skriftlig enkät om den virtuella lärmiljön vid Göteborgs universitet. En student som deltar i eller har genomgått en kurs ska ges möjlighet att anonymt uttrycka erfarenheter av och synpunkter på kursen i en kursvärdering. En sammanställning av kursutvärderingen och reflektioner från kursansvarig bör göras tillgänglig för studenterna inom rimlig tid efter kursens slut.