



Guía Docente				
Datos Identificativos				2012/13
Asignatura (*)	Estructura e Reactividade dos Compostos Orgánicos	Código	610446206	
Titulación				
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	1º cuatrimestre	Primeiro	Optativa	4
Idioma	Castelán			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación	Ojea Cao, Vicente	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es	
Profesorado	Ojea Cao, Vicente Rodríguez Gonzalez, Jaime	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es jaime.rodriguez@udc.es	
Web				
Descrición xeral	El curso pretende proporcionar una visión global de los fundamentos teóricos requeridos en la interpretación y la predicción de la reactividad de los compuestos orgánicos. Se establecerán las bases racionales que permiten la interpretación del curso regio y estereoquímico de algunos procesos de reacción en términos de la estructura molecular y los orbitales moleculares implicados.			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación

Resultados da aprendizaxe			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)			Competencias da titulación
Mellora dos coñecementos no ámbito da Química Orgánica	AM11		
Mellora da capacidade de resolución de problemas		BM12	
Mellora da capacidade de análise e síntese		BM11	
Capacidade de aprendizaxe autónomo		BM4	
Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.			CM1
Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida.			CM3

Contidos	
Temas	Subtemas
Tema 1: Control estérico, conformacional y estereoelectrónico de la reactividad	Enantiómeros, diastereoisómeros, proquiralidad. Análisis conformacional de los principales tipos de compuestos. Métodos teóricos para el análisis conformacional: mecánica molecular, métodos semiempíricos y métodos ab initio. Efectos estereoelectrónicos y reactividad. Reglas de Baldwin. Ecuación de Winstein-Holmes y Principio de Curtin-Hammett
Tema 2: Procesos de reacción bajo control orbital.	Teoría de las perturbaciones. Teoría de los orbitales frontera. Estudio de los procesos concertados: cicloadiciones, reacciones electrocíclicas y trasposiciones sigmatrópicas. Conservación de la simetría orbital. Reglas de Woodward y Hoffmann
Tema 3: Conceptos de RMN.	El desplazamiento químico y acoplamiento espín-espín. La relajación en RMN: NOE, nOediff. La transferencia de polarización: experimentos INEPT, DEPT y APT. Espectroscopia RMN bidimensional, conceptos básicos. Experimentos COSY, HETCOR, NOESY, ROESY e INADEQUATE. Espectroscopia inversa: HMQC vs. HSQC. HMBC. Métodos de J-resuelta: JHH; JCH. Medidas de constantes de acoplamiento a larga distancia, LR-COSY y J-HMBC. Experimentos más complejos: 1H-1H TOCSY (HOHAHA), HSQC-TOCSY, HSQC-NOESY y HETLOC.



Tema 4: Espectrometría de masas.	Métodos de ionización: CI, FAB, APCI, ESI y MALDI. Aplicaciones para la obtención de la fórmula molecular de un compuesto. Espectrometría de masas de biomoléculas: proteínas y ácidos nucleicos. Espectrometría de masas en tándem (MS/MS).
Práctica 1	Análisis y resolución de problemas sobre el control de la reactividad de compuestos orgánicos, y utilización de métodos computacionales para la modelización molecular
Práctica 2	Experimentos 1H, 13C, DEPT, 1H-1H COSY y TOCSY (HOHAHA), HMQC Y HSQC, HMBC en espectrómetro de 500 MHz.

Planificación			
Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Actividades iniciais	1	0	1
Prácticas de laboratorio	20	20	40
Presentación oral	1	2	3
Sesión maxistral	20	0	20
Traballos tutelados	0	35	35
Atención personalizada	1	0	1

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Actividades iniciais	Presentación del curso y su programación de contenidos, actividades y criterios de evaluación
Prácticas de laboratorio	Análisis y resolución de los problemas seleccionados por el profesor, mediante la utilización de métodos computacionales. Elucidación estructural de compuestos desconocidos mediante análisis e integración de datos de RMN y masas
Presentación oral	Exposición del trabajo tutelado, con apoyo de nuevas tecnologías.
Sesión maxistral	Desarrollo de los contenidos fundamentales del programa mediante explicaciones teóricas y ejemplos prácticos.
Traballos tutelados	Elaboración de un informe sobre la predicción y/o interpretación de la reactividad de compuestos orgánicos con especial atención a la utilización de metodoloxías computacionales

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Traballos tutelados	Seguimiento y orientación durante la elaboración del informe sobre reactividad de los compuestos orgánicos, en sesiones individuales en el horario de tutorías del profesor.

Avaliación		
Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Prácticas de laboratorio	Evaluación continua del trabajo en el laboratorio en donde se tendrá en cuenta el interés y la actitud del alumno, la destreza alcanzada en la utilización de las heramientas informáticas para la modelización molecular y la cantidad y complejidad de los sistemas modelizados, así como el la resolución de problemas de elucidación estructural mediante el análisis de datos espectroscópicos	50
Presentación oral	Evaluación de las exposiciones orales correspondientes al trabajo de revisión bibliográfica y las soluciones de los problemas de elucidación estructural	20
Sesión maxistral	Evaluación de la asistencia y participación activa mediante preguntas y respuestas durante las lecciones y de maneta previa o posterior mediante e-mail	10
Traballos tutelados	Se valorará la elaboración de un trabajo de revisión bibliográfica y su redacción de manera concisa y rigurosa, empleando la terminoloxía adecuada, sobre alguno de los contenidos presentados en las sesiones magistrales	20



Outros		
--------	--	--

Observacións avaliación

Fontes de información

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none">- Hesse, M. (1995). Métodos Espectroscópicos en Química Orgánica. Síntesis, Madrid- Anslyn, E. V. (2004). Modern Physical Organic Chemistry. University Science, Sausalito- Robinson, M. J. T (2000). Organic Stereochemistry. University Press, Oxford
Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none">- Rodríguez, J. (2009). Organic Structure Analysis, 2nd Ed.. University Press- Eliel, E. L. (1994). Stereochemistry of Organic Compounds. New York, Wiley

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Química Bioorgánica e Supramolecular/610446216

Química Orgánica Aplicada/610446217

Química Sostible/610446218

Materias que continúan o temario

Síntese Orgánica/610446221

Observacións

(*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías