



Guía Docente				
Datos Identificativos				2013/14
Asignatura (*)	Reactividade Orgánica e Química Organometálica		Código	610500020
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	2º cuatrimestre	Primeiro	Optativa	3
Idioma				
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación	Ojea Cao, Vicente	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es	
Profesorado	Ojea Cao, Vicente Perez Sestelo, Jose	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es jose.perez.sestelo@udc.es	
Web				
Descrición xeral	Esta asignatura se organiza en dos bloques complementarios de Reactividad Orgánica y Química Organometálica. En el primer bloque se pretende por una parte 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. En el bloque de Química Organometálica se presentarán los fundamentos de esta área de la Química y sus aplicaciones más importantes en la Síntesis Orgánica.			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación
A5	Capacitación para o deseño de vías de síntese e retrosíntese de novos compostos.
A9	Coñecer algunhas aplicacións básicas da química computacional e dos programas de cálculo máis utilizados nos ámbitos da química e o medio ambiente.
B1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación.
C4	Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.
C11	Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.

Resultados da aprendizaxe			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)			Competencias da titulación
Capacitación para el diseño de vías de síntesis y retrosíntesis basadas en el empleo de reactivos organometálicos.	AM5		
Conocer algunas aplicaciones básicas de la química computacional para la interpretación del curso regio y estereoquímico de algunos procesos de reacción en términos de la estructura molecular y los orbitales moleculares implicados	AM9		
Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.		BM1	
Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma			CM4
Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad.			CM11

Contidos	
Temas	Subtemas



Tema 1: Control estérico, conformacional y estereoelectrónico de la reactividad	1.1 Enantiómeros, diastereoisómeros, proquiralidad. 1.2. Análisis conformacional de los principales tipos de compuestos. 1.3 Métodos teóricos para el análisis conformacional: mecánica molecular, métodos semiempíricos y métodos ab initio. 1.4 Efectos estereoelectrónicos y reactividad. 1.5 Reglas de Baldwin. Ecuación de Winstein-Holmes y Principio de Curtin-Hammett
Tema 2: Química Organometálica	2.1 La química organometálica en síntesis orgánica: fundamentos, mecanismos y aplicaciones; 2.2 Reacciones de acoplamiento (Negishi, Suzuki, Stille); 2.3 Reacciones de inserción, adición electrófila y carbonilación de alquenos y alquinos (Heck, Pausond-Kand, Hidroformilación); 2.4 Reacciones de carbenos (metátesis); 2.5 Reacciones de cicloadición y cicloisomerización catalizadas por metales de transición
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	Desarrollo experimental de una reacción clave en Química Organometálica

Planificación

Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Actividades iniciais	1	0	1
Sesión maxistral	11	0	11
Prácticas de laboratorio	10	20	30
Traballos tutelados	0	20	20
Proba obxectiva	1	0	1
Presentación oral	2	10	12
Atención personalizada	0	0	0

*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
Sesión maxistral	Desarrollo de los contenidos fundamentales del programa mediante explicaciones teóricas y ejemplos prácticos.
Prácticas de laboratorio	Realización de procedimiento experimental de química organometálica. Análisis y resolución de los problemas seleccionados por el profesor, mediante la utilización de métodos computacionales.
Traballos tutelados	Preparación del trabajo experimental. Elaboración de un informe sobre la predicción y/o interpretación de la reactividad de compuestos orgánicos con especial atención a la utilización de metodologías computacionales
Proba obxectiva	Examen sobre los contenidos explicados en las sesiones magistrales
Presentación oral	Exposición del trabajo tutelado.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Traballos tutelados	Los alumnos recibirán atención personalizada por parte del profesor durante las sesiones de prácticas de laboratorio.
Prácticas de laboratorio	Seguimiento y orientación durante la elaboración del informe sobre reactividad de los compuestos orgánicos y la preparación del trabajo experimental, en sesiones individuales en el horario de tutorías del profesor.

Avaliación

Metodoloxías	Descrición	Cualificación
--------------	------------	---------------



Traballos tutelados	Se valorará la elaboración de dos trabajo de revisión bibliográfica, uno sobre la práctica experimental con reactivos organometálicos y otro sobre la modelización computacional de algún sistema de interés para el alumno.	20
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 los procedimientos experimentales y la utilización de las herramientas informáticas para la modelización molecular y la cantidad y complejidad de los sistemas modelizados	20
Presentación oral	Evaluación de las exposiciones orales correspondientes al trabajo experimental y de modelización computacional	20
Proba obxectiva	Examen sobre los contenidos explicados en las sesiones magistrales	40

Observacións avaliación

La asistencia a las actividades programadas es obligatoria

Fontes de información

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none">- Foresman, J. B.; Frisch, A. (1996). Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Pittsburg, PA: Gaussian- Robinson, M. J. T (). Organic Stereochemistry. Oxford: University Press- Bates, R. (). Organic Synthesis using Transition Metals Second edition . Blackwell- Eliel, E. L (). Stereochemistry of Organic Compounds. New York: Wiley- Hegedus, L. S. (). Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules. Mill Valley: University Science Books
Bibliografía complementaria	

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

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