



Guía Docente				
Datos Identificativos				2014/15
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	Castelán			
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 materia organízase en dous bloques complementarios de Reactividade Orgánica e Química Organometálica. No primeiro bloque preténdese proporcionar unha visión global dos fundamentos teóricos requiridos na interpretación e a predición da reactividade dos compostos orgánicos. Estableceranse as bases racionais que permiten a interpretación do curso rexio e estereoquímico dalgúns procesos de reacción en termos da estrutura molecular e os orbitais moleculares implicados. No bloque de Química Organometálica presentaranse os fundamentos desta área da Química e as súas aplicacións máis importantes na Síntese 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 o deseño de vías de síntese e retrosíntese baseadas no emprego de reactivos organometálicos.	AM5		
Coñecer algunhas aplicacións básicas da química computacional para a interpretación do curso rexio e estereoquímico dos procesos de reacción en termos da estrutura molecular e os orbitais moleculares implicados	AM9		
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.		BM1	
Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma			CM4
Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.			CM11

Contidos	
Temas	Subtemas



Tema 1: Control estérico, conformacional e estereoelectrónico da reactividad	1.1 Enantiómeros, diastereoisómeros, proquiralidad. 1.2. Análise conformacional dos principais tipos de compostos. 1.3 Métodos teóricos para a análise conformacional: mecánica molecular, métodos semiempíricos e métodos ab initio. 1.4 Efectos estereoelectrónicos e reactividad. 1.5 Regras de Baldwin. Ecuación de Winstein-Holmes e Principio de Curtin-Hammett
Tema 2: Química Organometálica	2.1 A química organometálica en síntese orgánica: fundamentos e mecanismos de reacción; 2.2 Reaccións de acoplamento; 2.3 reaccións de inserción, adición eletrofílica e carbonilación de alcenos e alquinos; 2.4 Reaccións de carbenes; 2.5 Reaccións de activación do C-H
Práctica 1	Análise e resolución de problemas sobre o control da reactividad de compostos orgánicos, e utilización de métodos computacionais para a modelización molecular.
Práctica 2	Desarrollo experimental dunha reacción clave na 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 do curso e a súa programación de contidos, actividades e criterios de avaliación
Sesión maxistral	Desenvolvemento dos contidos fundamentais do programa mediante explicacións teóricas e exemplos prácticos.
Prácticas de laboratorio	Realización de procedemento experimental de química organometálica. Análise e resolución dos problemas seleccionados polo profesor, mediante a utilización de métodos computacionais.
Traballos tutelados	Preparación do traballo experimental. Elaboración dun informe sobre a predición e/ou interpretación da reactividad de compostos orgánicos con especial atención á utilización de metodoloxías computacionais
Proba obxectiva	Exame sobre os contidos de química organometalica explicados nas sesións maxistrais
Presentación oral	Exposición do traballo tutelado.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Traballos tutelados Prácticas de laboratorio	Seguimento e orientación durante a elaboración do informe sobre reactividad dos compostos orgánicos e a preparación do traballo experimental, en sesións individuais no horario de tutorías do profesor. Seguimento 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



Prácticas de laboratorio	Avaliación continua do traballo no laboratorio onde se terá en conta o interese e a actitude do alumno, a destreza alcanzada nos procedementos experimentais e a utilización das ferramentas informáticas para a modelización molecular e a cantidade e complexidade dos sistemas modelizados. Competencias avaliadas: A5, A9, B1, C4	30
Presentación oral	Avaliación das exposicións orais correspondentes ao traballo experimental e de modelización computacional. Competencias avaliadas: A5, A9, B1, C4, C11	50
Proba obxectiva	Exame sobre os contidos de química organometalica explicados nas sesións maxistrais. Competencias avaliadas: A5, C4	20

Observacións avaliación

A asistencia ás actividades programadas é obrigatoria

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