



| Guía Docente          |  |                    |                     |           |
|-----------------------|--|--------------------|---------------------|-----------|
| Datos Identificativos |  |                    |                     | 2017/18   |
| 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   |                    |                     |           |
| Modalidade docente    | Presencial   |                    |                     |           |
| Prerrequisitos        |  |                    |                     |           |
| Departamento          | Química  |                    |                     |           |
| Coordinación          | Ojea Cao, Vicente  | Correo electrónico | vicente.ojea@udc.es |           |
| Profesorado           | Ojea Cao, Vicente  | Correo electrónico | vicente.ojea@udc.es |           |
| Web                   |  |                    |                     |           |
| Descrición xeral      | Esta materia oriéntase ao estudo da estrutura, as propiedades e a reactividade dos compostos orgánicos e organometálicos, tanto mediante técnicas experimentais como computacionais, prestando especial atención ás aplicacións sintéticas dos metais de transición en Síntese Orgánica. |                    |                     |           |

| Competencias / Resultados do título |  |
|-------------------------------------|--|
| Código                              | Competencias / Resultados do título  |
| A1                                  | Coñecemento das realidades interdisciplinares da Química e do Medio Ambiente, dos temas punteiros nestas disciplinas e das perspectivas de futuro.   |
| A2                                  | Deseño de novas especies químicas e materiais con propiedades determinadas.  |
| A3                                  | Capacitar ao alumno para o desenvolvemento dun traballo de investigación nun campo da Química ou do Medio Ambiente, incluíndo os procesos de caracterización de materiais, o estudo das súas propiedades fisicoquímicas e biolóxicas e dos procesos que poden sufrir no medio natural.       |
| A4                                  | Coñecer en profundidade as características e fundamentos de diversos modelos químicos para o estudo de sistemas orgánicos, inorgánicos e biolóxicos, incluídos os materiais con proxección tecnolóxica.  |
| A5                                  | Capacitación para o deseño de vías de síntese e retrosíntese de novos compostos.   |
| A11                                 | Coñecer as distintas técnicas experimentais e computacionais orientadas á caracterización de mecanismos de reacción.   |
| 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.   |
| B2                                  | Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornas novas ou pouco coñecidas dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.   |
| B3                                  | Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos. |
| B4                                  | Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.   |
| B6                                  | Ser capaz de analizar datos e situacións, xestionar a información dispoñible e sintetizala, todo iso a un nivel especializado.   |
| C3                                  | Ser capaz de adaptarse a situacións novas, mostrando creatividade, iniciativa, espírito emprendedor e capacidade de liderado.  |
| C5                                  | Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro.  |
| C6                                  | 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.  |
| C9                                  | Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse.  |
| C11                                 | Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.  |

## Resultados da aprendizaxe

| Resultados de aprendizaxe   | Competencias / Resultados do título |                          |                           |
|---|-------------------------------------|--------------------------|---------------------------|
| Coñecer en profundidade as características e fundamentos de diversos modelos para o estudo da estrutura, as propiedades e a reactividad de compostos orgánicos e organometálicos. Coñecer e aplicar as técnicas básicas da química computacional no estudo da estrutura, as propiedades e os procesos de reacción dos compostos orgánicos e organometálicos | AM1<br>AM3<br>AM4<br>AM11           | BM1<br>BM2<br>BM4<br>BM6 | CM6<br>CM9                |
| Capacitación para o deseño de vías de sínteses e retrosíntesis baseadas no emprego de reactivos organometálicos.  | AM1<br>AM2<br>AM5                   | BM1<br>BM2<br>BM3<br>BM6 | CM3<br>CM5<br>CM9<br>CM11 |

| Contidos  |  |
|---|--|
| Temas   | Subtemas   |
| Tema 1: Estrutura, reactividad e modelización computacional dos compostos orgánicos | 1.1 Estereoquímica e análise conformacional. 1.2 Métodos computacionais: mecánica molecular, métodos semiempíricos e métodos ab initio. 1.3 Efectos estereoelectrónicos e reactividad, 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 alcinos; 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    | Competencias / Resultados            | Horas lectivas (presenciais e virtuais) | Horas traballo autónomo | Horas totais |
| Sesión maxistral         | A1 A2 A3 A4 A5 A11<br>C5             | 12                                      | 0                       | 12           |
| Prácticas de laboratorio | A2 A3 A5 A11 B1 B2<br>B6 C6          | 8                                       | 4                       | 12           |
| Traballos tutelados      | A11 B1 B2 B6 C3 C6                   | 0                                       | 23                      | 23           |
| Seminario                | A3 A4 A5 B2 B3 B4<br>B6 C3 C5 C9 C11 | 2                                       | 22                      | 24           |
| Presentación oral        | A3 A4 A11 B1 B2 B4<br>C11            | 1                                       | 2                       | 3            |
| 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  |
| 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      | Elaboración dun informe sobre a predición e/ou interpretación da reactividad de compostos orgánicos con especial atención á utilización de metodoloxías computacionais                                      |
| Seminario                | Exporanse exercicios relacionados cos contidos de química organometálica e solucionaranse nos seminarios. Os estudantes deberán realízalos por escrito, entregalos o profesor e expolos durante o seminario |



|                   |                                  |
|-------------------|----------------------------------|
| Presentación oral | Exposición do traballo tutelado. |
|-------------------|----------------------------------|

## Atención personalizada

| Metodoloxías   | Descrición   |
|--|--|
| Seminario<br>Traballos tutelados<br>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. |

## Avaliación

| Metodoloxías             | Competencias / Resultados            | Descrición   | Cualificación |
|--------------------------|--------------------------------------|--|---------------|
| Seminario                | A3 A4 A5 B2 B3 B4<br>B6 C3 C5 C9 C11 | Valorarase o traballo realizado na resolución dos problemas propostos sobre química organometálica, mediante a entrega destes e a exposición de resultados.  | 40            |
| Traballos tutelados      | A11 B1 B2 B6 C3 C6                   | Valorarase a elaboración do traballo de revisión bibliográfica e modelización computacional dalgún sistema de interese para o alumno.  | 30            |
| Prácticas de laboratorio | A2 A3 A5 A11 B1 B2<br>B6 C6          | 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. | 20            |
| Presentación oral        | A3 A4 A11 B1 B2 B4<br>C11            | Avaliación da exposición oral correspondente ao traballo de modelización computacional.  | 10            |

## Observacións avaliación

A asistencia ás actividades programadas é obrigatoria. Excepcionalmente, no caso de que o estudante, por razóns debidamente xustificadas, non puidera realizar todas as probas de avaliación continua (prácticas, seminarios e presentación oral), o profesor adoptará as medidas que considere oportunas para non prexudicar a súa cualificación.

## Fontes de información

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

## 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