



Guía Docente			
Datos Identificativos			2020/21
Asignatura (*)	Reactividade Orgánica e Química Organometálica	Código	610500020
Titulación			
Descriptores			
Ciclo	Período	Curso	Tipo
Mestrado Oficial	2º cuatrimestre	Primeiro	Optativa
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			
Descripción xeral	Esta materia orientase 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		
Plan de continxencia	<p>1. Modificacións nos contidos: non se realizan cambios.</p> <p>2. Metodoloxías:</p> <p>*Metodoloxías docentes que se manteñen: todas,</p> <p>*Metodoloxías docentes que se modifican: todas as metodoloxías adáptanse á modalidade non presencial a través de Moodle e Teams e mantense a programación establecida no calendario de coordinación.</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado: o seguimento personalizado realizarase a través do correo electrónico ou a plataforma Moodle a demanda do alumnado e, na medida do posible, no horario establecido para as tutorías. Para os estudiantes con dedicación a tempo parcial ou modalidades específicas de aprendizaxe ou apoio á diversidade, facilitarase a atención personalizada dentro da flexibilidade permitida polos horarios de coordinación e os recursos materiais e humanos.</p> <p>4. Modificacións na avaliación: as contribucións á cualificación final das metodoloxías availables non se modifican.</p> <p>*Observacións de avaliación: mantéñense todas as observacións incluídas na guía docente.</p> <p>5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía: non se realizan modificacións, todos os materiais necesarios atoparanse disponíveis en Moodle ou mediante acceso aos recursos electrónicos disponibles na Biblioteca do Centro.</p>		

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título

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 BM1 CM6 AM3 BM2 CM9 AM4 BM4 AM11 BM6
Capacitación para o deseño de vías de síntesis e retrosíntesis baseadas no emprego de reactivos organometálicos.			AM1 BM1 CM3 AM2 BM2 CM5 AM5 BM3 CM9 BM6 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 Reacciones de acoplamento; 2.3 reacciones de inserción, adición eletrofílica e carbonilação de alcenos e alcinos; 2.4 Reacciones de carbenos; 2.5 Reacciones 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 C5	12	0	12
Prácticas de laboratorio	A2 A3 A5 A11 B1 B2 B6 C6	8	4	12
Traballos tutelados	A11 B1 B2 B6 C3 C6	0	23	23
Seminario	A3 A4 A5 B2 B3 B4 B6 C3 C5 C9 C11	2	22	24
Presentación oral	A3 A4 A11 B1 B2 B4 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	Descripción
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 estudiantes deberán realizarlos por escrito, entregálos o profesor e expolos durante o seminario
Presentación oral	Exposición do traballo tutelado.

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

Avaliación



Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descripción	Cualificación
Seminario	A3 A4 A5 B2 B3 B4 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 trabalho de revisión bibliográfica e modelización computacional dalgún sistema de interese para o alumno.	30
Prácticas de laboratorio	A2 A3 A5 A11 B1 B2 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 C11	Avaliación da exposición oral correspondente ao traballo de modelización computacional.	10

Observacións avaliación

A asistencia ás actividades programadas é obligatoria. Excepcionalmente, no caso de que o estudiante, 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

Bibliografía básica	- Robinson, M. J. T (). Organic Stereochemistry. Oxford: University Press - Eliel, E. L (). Stereochemistry of Organic Compounds. New York: Wiley - Foresman, J. B.; Frisch, A. (1996). Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Pittsburg, PA: Gaussian - Hegedus, L. S. (). Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules. Mill Valley: University Science Books - Bates, R. (). Organic Synthesis using Transition Metals Second edition . Blackwell
Bibliografía complementaria	

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Materias que se recomienda 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