



| Guía docente | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|---------------------|-----------|
| Datos Identificativos | | | | 2020/21 |
| Asignatura (*) | Reactividad Orgánica y Química Organometálica | | Código | 610500020 |
| Titulación | Mestrado Universitario en Ciencias, Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012) | | | |
| Descriptorios | | | | |
| Ciclo | Periodo | Curso | Tipo | Créditos |
| Máster Oficial | 2º cuatrimestre | Primero | Optativa | 3 |
| Idioma | Castellano | | | |
| Modalidad docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química | | | |
| Coordinador/a | Ojea Cao, Vicente | Correo electrónico | vicente.ojea@udc.es | |
| Profesorado | Ojea Cao, Vicente | Correo electrónico | vicente.ojea@udc.es | |
| Web | | | | |
| Descripción general | Esta asignatura se orienta al estudio de la estructura, las propiedades y la reactividad de los compuestos orgánicos y organometálicos, tanto mediante técnicas experimentales como computacionales, prestando especial atención a las aplicaciones sintéticas de los metales de transición en Síntesis Orgánica. | | | |
| Plan de contingencia | <p>1. Modificaciones en los contenidos: no se realizan cambios.</p> <p>2. Metodologías: *Metodologías docentes que se mantienen: todas, *Metodologías docentes que se modifican: todas las metodologías se adaptan a la modalidad no presencial a través de Moodle y Teams y se mantiene la programación establecida en el calendario de coordinación.</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada al alumnado: el seguimiento personalizado se realizará a través del correo electrónico o la plataforma Moodle a demanda del alumnado y, en la medida de lo posible, en el horario establecido para las tutorías. Para los estudiantes con dedicación a tiempo parcial o modalidades específicas de aprendizaje o apoyo a la diversidad, se facilitará la atención personalizada dentro de la flexibilidad permitida por los horarios de coordinación y los recursos materiales y humanos.</p> <p>4. Modificaciones en la evaluación: las contribuciones a la calificación final de las metodologías evaluables no se modifican. *Observaciones de evaluación: se mantienen todas las observaciones incluidas en la guía docente.</p> <p>5. Modificaciones de la bibliografía o webgrafía: no se realizan modificaciones, todos los materiales necesarios se encontrarán disponibles en Moodle o mediante acceso a los recursos electrónicos disponibles en la Biblioteca del Centro.</p> | | | |

| Competencias / Resultados del título | |
|--------------------------------------|--|
| Código | Competencias / Resultados del título |
| A1 | Conocimiento de las realidades interdisciplinares de la Química y del Medio Ambiente, de los temas punteros en estas disciplinas y de las perspectivas de futuro. |
| A2 | Diseño de nuevas especies químicas y materiales con propiedades determinadas. |
| A3 | Capacitar al alumno para el desarrollo de un trabajo de investigación en un campo de la Química o del Medio Ambiente, incluyendo los procesos de caracterización de materiales, el estudio de sus propiedades fisicoquímicas y biológicas y de los procesos que pueden sufrir en el medio natural. |
| A4 | Conocer en profundidad las características y fundamentos de diversos modelos químicos para el estudio de sistemas orgánicos, inorgánicos y biológicos, incluidos los materiales con proyección tecnológica. |
| A5 | Capacitación para el diseño de vías de síntesis y retrosíntesis de nuevos compuestos. |
| A11 | Conocer las distintas técnicas experimentales y computacionales orientadas a la caracterización de mecanismos de reacción. |
| B1 | 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. |



| | |
|-----|---|
| B2 | Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio. |
| B3 | Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios. |
| B4 | Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades. |
| B6 | Ser capaz de analizar datos y situaciones, gestionar la información disponible y sintetizarla, todo ello a un nivel especializado. |
| C3 | Ser capaz de adaptarse a situaciones nuevas, mostrando creatividad, iniciativa, espíritu emprendedor y capacidad de liderazgo. |
| C5 | Dominar la expresión y la comprensión de forma oral y escrita de un idioma extranjero. |
| C6 | Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida. |
| C9 | Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse. |
| C11 | Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad. |

| Resultados de aprendizaje | | | |
|--|--------------------------------------|--------------------------|---------------------------|
| Resultados de aprendizaje | Competencias / Resultados del título | | |
| Conocer en profundidad las características y fundamentos de diversos modelos para el estudio de la estructura, las propiedades y la reactividad de compuestos orgánicos y organometálicos. Conocer y aplicar las técnicas básicas de la química computacional en el estudio de la estructura, las propiedades y los procesos de reacción de los compuestos orgánicos y organometálicos | AM1 AM3 AM4 AM11 | BM1 BM2 BM4 BM6 | CM6 CM9 |
| Conocer las aplicaciones más importantes de los metales de transición en síntesis orgánica | AM1 AM2 AM5 | BM1 BM2 BM3 BM6 | CM3 CM5 CM9 CM11 |

| Contenidos | |
|--|---|
| Tema | Subtema |
| Tema 1: Estructura, reactividad y modelización computacional de los compuestos orgánicos | 1.1 Estereoquímica y análisis conformacional. 1.2 Métodos computacionales: mecánica molecular, métodos semiempíricos e métodos ab initio. 1.3 Efectos estereoelectrónicos y reactividad, 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 y mecanismos de reacción; 2.2 Reacciones de acoplamiento; 2.3 Reacciones de inserción, adición electrófila y carbonilación de alquenos y alquinos; 2.4 Reacciones de carbenos; 2.5 Reacciones de activación C-H |
| Práctica 1. | Aplicación de las técnicas computacionales al estudio de la estructura, las propiedades y la reactividad de los compuestos orgánicos y organometálicos |
| Práctica 2. | Desarrollo experimental de una reacción explicada en el tema de Química Organometálica |

| Planificación | | | | |
|------------------------|---------------------------|---|------------------------|---------------|
| Metodologías / pruebas | Competencias / Resultados | Horas lectivas (presenciales y virtuales) | Horas trabajo autónomo | Horas totales |
| Sesión magistral | A1 A2 A3 A4 A5 A11 C5 | 12 | 0 | 12 |



| | | | | |
|--------------------------|--------------------------------------|---|----|----|
| Prácticas de laboratorio | A2 A3 A5 A11 B1 B2 B6 C6 | 8 | 4 | 12 |
| Trabajos 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 |

(*Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos

| Metodologías | |
|--------------------------|--|
| Metodologías | Descripción |
| Sesión magistral | 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. |
| Trabajos tutelados | 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 |
| Seminario | Se plantearán ejercicios relacionados con los contenidos de química organometálica y se solucionarán en los seminarios. Los estudiantes deberán realizarlos por escrito, entregarlos la profesor y exponerlos durante el seminario |
| Presentación oral | Exposición del trabajo tutelado con la ayuda de TICs |

| Atención personalizada | |
|---|---|
| Metodologías | Descripción |
| Seminario Trabajos tutelados Prácticas de laboratorio | Seguimiento y orientación durante (a) la elaboración del informe sobre el estudio computacional de la estructura y reactividad de los compuestos orgánicos y/o organometálicos; (b) la resolución de los ejercicios planteados en los seminarios y (c) la preparación del trabajo experimental y la exposición oral, en sesiones individuales en el horario de tutorías del profesor. |

| Evaluación | | | |
|--------------------------|--------------------------------------|---|--------------|
| Metodologías | Competencias / Resultados | Descripción | Calificación |
| Seminario | A3 A4 A5 B2 B3 B4 B6 C3 C5 C9 C11 | Se valorará el trabajo realizado en la resolución de los problemas propuestos sobre química organometálica, mediante la entrega de los mismos y la exposición de los resultados | 40 |
| Trabajos tutelados | A11 B1 B2 B6 C3 C6 | Se valorará la elaboración de un trabajo de revisión bibliográfica y modelización computacional de algún sistema de interés para el alumno | 30 |
| Prácticas de laboratorio | A2 A3 A5 A11 B1 B2 B6 C6 | 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 | A3 A4 A11 B1 B2 B4 C11 | Exposición oral del trabajo tutelado sobre modelización computacional | 10 |

| Observaciones evaluación |
|---|
| La asistencia a las actividades programadas es obligatoria. Excepcionalmente, en el caso de que el estudiante, por razones debidamente justificadas, no pudiera realizar todas las pruebas de evaluación continua (prácticas, seminarios y presentación oral), el profesor adoptará las medidas que considere oportunas para no perjudicar su calificación. |



Fuentes de información

| | |
|-----------------------|---|
| Básica | <ul style="list-style-type: none">- 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 |
| Complementaría | |

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Asignaturas que continúan el temario

Otros comentarios

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías