



Guía Docente				
Datos Identificativos				2022/23
Asignatura (*)	Reactividade Orgánica e Química Organometálica		Código	610500020
Titulación				
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 Perez Sestelo, Jose	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es jose.perez.sestelo@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

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 AM3 AM4 AM11	BM1 BM2 BM4 BM6
Capacitación para o deseño de vías de sínteses e retrosíntesis baseadas no emprego de reactivos organometálicos.	AM1 AM2 AM5	BM1 BM2 BM3 BM6	CM3 CM5 CM9 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 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	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 realizalos por escrito, entregalos o profesor e expolos durante o seminario
Presentación oral	Exposición do traballo tutelado.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Seminario 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.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descrición	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 traballo 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 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