



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|---|--------------------|--|-----------|
| Datos Identificativos | | | | 2022/23 |
| 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 Perez Sestelo, Jose | Correo electrónico | vicente.ojea@udc.es jose.perez.sestelo@udc.es | |
| Web | | | | |
| Descrición xeral | Esta materia oríentase 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 AM3 AM4 AM11 | BM1 BM2 BM4 BM6 | CM6 CM9 |
| 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 realízalos 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

| | |
|------------------------------------|---|
| Bibliografía 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 |
| 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