



Guia docente				
Datos Identificativos				2023/24
Asignatura (*)	Reactividad Orgánica y Química Organometálica		Código	610500020
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias, Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descriptor				
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	
	Perez Sestelo, Jose		jose.perez.sestelo@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, prestando especial atención a las técnicas computacionales y las aplicaciones sintéticas de los metales de transición en Síntesis Orgánica.			

Competencias del título	
Código	Competencias 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 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	AM2 AM5	BM3	CM3 CM5 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
Prácticas	Aplicación de las técnicas computacionales al estudio de la estructura, las propiedades y la reactividad de los compuestos orgánicos y/o organometálicos

Planificación

Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	A1 A2 A3 A4 A5 A11 C5	12	0	12
Prácticas a través de TIC	A2 A3 A5 A11 B1 B2 B6 C6	4	4	8
Trabajos tutelados	A11 B1 B2 B6 C3 C6	0	20	20
Seminario	A3 A4 A5 B2 B3 B4 B6 C3 C5 C9 C11	2	16	18
Prueba objetiva	A5 B2	2	10	12
Presentación oral	A3 A4 A11 B1 B2 B4 C11	1	3	4
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 a través de TIC	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 al profesor y exponerlos durante el seminario



Prueba objetiva	Realización de una prueba escrita relacionada con la parte de química organometálica. Consistirá en la resolución de ejercicios similares a los tratados en los seminarios
Presentación oral	Exposición del trabajo tutelado con la ayuda de TICs

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Seminario Prueba objetiva Trabajos tutelados Prácticas a través de TIC	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 en sesiones individuales en el horario de tutorías del profesor.

Evaluación			
Metodologías	Competencias	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	20
Prueba objetiva	A5 B2	Se valorará la resolución de los ejercicios propuestos	30
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 a través de TIC	A2 A3 A5 A11 B1 B2 B6 C6	Evaluación continua del trabajo en donde se tendrá en cuenta el interés y la actitud del alumno, la utilización de las herramientas informáticas para la modelización molecular y la cantidad y complejidad de los sistemas modelizados.	10
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	- 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 - Jensen, Frank (2017). Introduction to Computational Chemistry. Wiley - 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
Complementaria	

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario



Otros comentarios

Programa Green Campus Facultad de Ciencias Para ayudar a conseguir un entorno inmediato sustentable y cumplir con el punto 6 da "Declaración Ambiental da Facultad de Ciencias (2020)", os traballos documentales que se realicen en esta materia se solicitarán maioritariamente en formato virtual y soporte informático.

(*) 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