



Guía Docente				
Datos Identificativos				2023/24
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 prestando especial atención ás técnicas computacionais e as 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	BM1	CM6
	AM3	BM2	CM9
	AM4	BM4	
	AM11	BM6	
Capacitación para o deseño de vías de sínteses e retrosíntesis baseadas no emprego de reactivos organometálicos.	AM2	BM3	CM3
	AM5		CM5
			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 alenos e alcinos; 2.4 Reaccións de carbenes; 2.5 Reaccións de activación do C-H
Prácticas	Aplicación de técnicas computacionais ao estudo da estrutura, propiedades e reactividade de compostos orgánicos e/ou organometálicos

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 a través de TIC	A2 A3 A5 A11 B1 B2 B6 C6	4	4	8
Traballos 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
Proba obxectiva	A5 B2	2	10	12
Presentación oral	A3 A4 A11 B1 B2 B4 C11	1	3	4
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 a través de TIC	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 reactividade 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
Proba obxectiva	Resolución de exercicios sobre química organometálica análogos a os traballados nas sesións de seminario
Presentación oral	Exposición do traballo tutelado.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Seminario Proba obxectiva Traballos tutelados Prácticas a través de TIC	Seguimento e orientación durante (a) a elaboración do informe sobre o estudo computacional da estrutura e reactividade dos compostos orgánicos e/ou organometálicos; (b) a resolución dos exercicios expostos nos seminarios 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.	20
Proba obxectiva	A5 B2	Valorarase as solucións a os exercicios plantexados sobre química organometálica	30
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 a través de TIC	A2 A3 A5 A11 B1 B2 B6 C6	Avaliación continua do traballo no onde se terá en conta o interese e a actitude do alumno, a destreza alcanzada na utilización das ferramentas informáticas para a modelización molecular e a cantidade e complexidade dos sistemas modelizados.	10
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- 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
Bibliografía complementaria	

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

Observacións

Programa Green Campus Facultade de Ciencias Para axudar a conseguir unha contorna inmediata sustentable e cumprir co punto 6 da "Declaración Ambiental da Facultade de Ciencias (2020)", vos traballos documentais que se realicen nesta materia solicitaranse maioritariamente en formato virtual e soporte informático.

(*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