



| Guía docente | | | | |
|-----------------------|---|--------------------|--|-----------|
| Datos Identificativos | | | | 2023/24 |
| 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 Perez Sestelo, Jose | Correo electrónico | vicente.ojea@udc.es 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 / 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 | BM1 | CM6 |
| | AM3 | BM2 | CM9 |
| | AM4 | BM4 | |
| | AM11 | BM6 | |
| Conocer las aplicaciones más importantes de los metales de transición en síntesis orgánica | AM2 | BM3 | CM3 |
| | AM5 | | 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 / Resultados | Horas lectivas (presenciales y virtuales) | Horas 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 / 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 | 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 | <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 |
| 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