



Guía Docente				
Datos Identificativos				2023/24
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 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
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.	AM2 AM5	BM3	CM3 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 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
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 reactividad 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

<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>- Jensen, Frank (2017). Introduction to Computational Chemistry. Wiley</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**



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 de acordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías