Guía Docente				
Datos Identificativos				2018/19
Asignatura (*)	Reactividade Orgánica e Química Organometálica		Código	610500020
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	2º cuadrimestre	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	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es	
Web				
Descrición xeral	Esta materia oriéntase 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 do título	
Código	Competencias 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 tecnológica.
A5	Capacitación para o deseño de vías de síntese e retrosíntese de novos compostos.
A11	Coñecer as distintas técnicas experimentais e computacionales 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 coñecidos 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 suizos.
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 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 síntese 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	Horas presenciais	Horas non presenciais / 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 realizalos 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**	**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	- 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