Guia docente				
Datos Identificativos				2018/19
Asignatura (*)	Reactividad Orgánica y Química Organometálica		Código	610500020
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descriptores				
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	
Web				
Descripción general	Esta asignatura se orienta al estudio de la estructura, las propiedades y la reactividad de los compuestos orgánicos y organometálicos, tanto mediante técnicas experimentales como computacionales, prestando especial atención a 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	AM1 AM2 AM5	BM1 BM2 BM3 BM6	CM3 CM5 CM9 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
Práctica 1.	Aplicación de las técnicas computacionales al estudio de la estructura, las propiedades y la reactividad de los compuestos orgánicos y organometálicos
Práctica 2.	Desarrollo experimental de una reacción explicada en el tema de Química Organometálica

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competéncias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	A1 A2 A3 A4 A5 A11 C5	12	0	12
Prácticas de laboratorio	A2 A3 A5 A11 B1 B2 B6 C6	8	4	12
Trabajos 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
(*)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 de laboratorio	Realización de procedimiento experimental de química organometálica. 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 la profesor y exponerlos durante el seminario
Presentación oral	Exposición del trabajo tutelado con la ayuda de TICs

Atención personalizada	
Metodologías	**Descripción**
Seminario Trabajos tutelados Prácticas de laboratorio	Seguimento y orientación durante (a) la elaboración del informe sobre el estudio computacional de la estructura y reactividad de los compostos orgánicos y/o organometálicos; (b) la resolución de los ejercicios planteados en los seminarios y (c) la preparación del trabajo experimental y la exposición oral, en sesiones individuais en el horario de tutorías del profesor.

Evaluación			
Metodologías	**Competéncias**	**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	40
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 de laboratorio	A2 A3 A5 A11 B1 B2 B6 C6	Evaluación continua del trabajo en el laboratorio en donde se tendrá en cuenta el interés y la actitud del alumno, la destreza alcanzada en los procedimientos experimentales y la utilización de las herramientas informáticas para la modelización molecular y la cantidad y complejidad de los sistemas modelizados.	20
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 probas 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 - 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
Complementária	

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

Otros comentarios

(*) 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