



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química orgánica III: Reacciones concertadas, radicalarias y fotoquímicas

Asignatura	Química orgánica III: Reacciones concertadas, radicalarias y fotoquímicas			
Código	V11G201V01305			
Titulación	Grado en Química			
Descriptor	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	3	1c
Lengua Impartición	#EnglishFriendly Castellano Gallego			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Nieto Faza, Olalla			
Profesorado	Gómez Bouzó, Uxía Gómez Pacios, María Generosa Nieto Faza, Olalla Silva López, Carlos			
Correo-e	faza@uvigo.es			
Web				
Descripción general	En esta materia se estudiarán procesos radicalarios, pericíclicos y fotoquímicos mediante una aproximación organizada alrededor de sus mecanismos y selectividad. La metodología, centrada en la resolución de problemas, incluye prácticas de laboratorio y de modelización molecular. Materia del programa English Friendly: El alumnado internacional podrá solicitar al profesorado a) materiales y referencias bibliográficas para seguir la asignatura en inglés, b) atención en inglés en las tutorías y c) pruebas y evaluaciones en inglés.			

Resultados de Formación y Aprendizaje

Código	
A3	Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética
A4	Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado
B3	Capacidad de gestión de la información
B4	Capacidad de análisis y síntesis
C18	Conocer las propiedades de los compuestos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos y organometálicos
C19	Conocer las principales rutas de síntesis en química orgánica, incluyendo las interconversiones de grupos funcionales y la formación de los enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo
C27	Demostrar capacidad para la observación, seguimiento y medida de procesos químicos, mediante el registro sistemático y fiable de los mismos y la presentación de informes del trabajo realizado
C28	Interpretar datos derivados de las observaciones y medidas del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
D3	Capacidad para comunicarse de forma oral y escrita en castellano y/o gallego e/o inglés

Resultados previstos en la materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje			
Conocer y aplicar los factores que afectan a la estabilidad de radicales orgánicos	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Reconocer y comprender mecanismos de reacción radicalarios y utilizar ese conocimiento para proponer estrategias para evitarlos o explotarlos.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Utilizar las reglas de Woodward-Hoffman para diferenciar entre caminos de reacción permitidos y prohibidos en reacciones pericíclicas.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3

Reconocer los mecanismos pericíclicos más comunes (electrociclaciones, cicloadiciones, reacciones sigmatrópicas y énicas) y utilizarlos en secuencias sintéticas.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Predecir la regio y estereoselectividad de reacciones pericíclicas.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Comprender los mecanismos de activación fotoquímica de moléculas orgánicas.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Comprender y aplicar los mecanismos de reacciones fotoquímicas: isomerizaciones de doble enlace, fotodisociaciones, fotorreducciones y reacciones pericíclicas.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Llevar a cabo reacciones pericíclicas, radicalarias y fotoquímicas y elaborar, separar y purificar sus productos mediante técnicas habituales.	A3 A4	B3 B4	C18 C19 C27 C28	D3
Utilizar técnicas espectroscópicas para determinar la estructura de compuestos orgánicos.	A3 A4	B3 B4	C18 C27 C28	D3
Utilizar herramientas de modelización molecular para estudiar las propiedades de compuestos orgánicos y mecanismos de reacción.	A3 A4	B3 B4	C18 C19 C27 C28	D3

Contenidos

Tema

Tema 1. Mecanismos de reacción	1.1. Mecanismo de reacción. Perfiles de reacción y teoría del estado de transición. 1.2. Fuerza conductora de la reacción. Teoría de los orbitales frontera. 1.3. Tipos de selectividad en transformaciones orgánicas. 1.4. Clasificaciones de mecanismos.
Tema 2. Reacciones radicalarias	2.1. Rotura homolítica vs. rotura heterolítica de enlaces. 2.2. Estabilidad de radicales. 2.3. Reacciones en cadena, halogenación de alcanos. 2.4. Polimerizaciones radicalarias. 2.5. Reducciones y acoplamientos reductivos radicalarios. 2.6. Reacciones radicalarias en la naturaleza.
Tema 3. Reacciones pericíclicas	3.1. Reglas de Woodward-Hoffmann. Conservación de la simetría orbital y aromaticidad del estado de transición. Reacciones permitidas y prohibidas térmicas y fotoquímicas. 3.2. Electrociclaciones. 3.3. Cicloadiciones. Teoría de orbitales frontera. 3.4. Reacciones sigmatrópicas y énicas.
Tema 4. Reacciones fotoquímicas	4.1. Espectros UV/vis de moléculas orgánicas. Propiedades de los estados excitados. 4.2. Procesos fotofísicos: desactivación unimolecular, conversión interna, cruces entre sistemas, emisión (fluorescencia, fosforescencia). 4.3. Isomerizaciones de doble enlace. 4.4. Fotodisociaciones. 4.5. Fotorreducciones. 4.6. Reacciones pericíclicas. 4.7. Reacciones fotoquímicas en la naturaleza.
Tema 5. Prácticas de laboratorio	En estas sesiones se llevarán a cabo experimentos relacionados con los temas anteriores. Síntesis, purificación y caracterización de compuestos orgánicos.
Tema 6. Prácticas de modelización molecular	Se utilizarán las herramientas de la química computacional para estudiar las propiedades de moléculas orgánicas y mecanismos de reacción relacionados con los temas anteriores.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Actividades introductorias	0	2	2
Flipped Learning	12	20	32
Resolución de problemas	24	44	68
Prácticas de laboratorio	28	10	38
Trabajo tutelado	0	8	8
Resolución de problemas y/o ejercicios	2	0	2

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías	
	Descripción
Actividades introductorias	Presentación de la asignatura y el profesorado, revisión de la guía docente y la estructura del curso en la plataforma de teledocencia.
Flipped Learning	Se requiere la interacción del alumnado con los materiales puestos a su disposición a través de la plataforma de teledocencia y la realización de las actividades propuestas para preparar las sesiones presenciales. En el aula se llevarán a cabo diversas actividades de consolidación, revisión, aclaración y aplicación de los conceptos estudiados.
Resolución de problemas	Se realizarán ejercicios prácticos de aplicación de los conceptos desarrollados en las sesiones de clase invertida.
Prácticas de laboratorio	Puesta en práctica en el laboratorio de las técnicas básicas de síntesis, separación, purificación y determinación estructural de compuestos orgánicos. El trabajo incluye la evaluación de riesgos, planificación de los experimentos y análisis de los resultados. Se utilizarán técnicas de modelización molecular para estudiar las propiedades de compuestos orgánicos y los mecanismos de reacciones seleccionadas. Para poder acceder a las sesiones de prácticas se requiere un trabajo previo de preparación a través de la plataforma de teledocencia. El trabajo se llevará a cabo de forma individual en sesiones de 3.5 horas y se documentará en un cuaderno de laboratorio. Tras las sesiones de prácticas se elaborará un trabajo de acuerdo con las instrucciones del profesorado.
Trabajo tutelado	

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Flipped Learning	La evaluación continua proporciona tanto al profesorado como al alumnado un registro de la evolución de su aprendizaje a lo largo del curso. Aunque el profesorado puede tomar la iniciativa de proponer sesiones tutoriales si aprecia riesgo, se recomienda que el alumnado utilice esta información para identificar fortalezas y debilidades, organizar su trabajo y buscar el apoyo que precise. Para resolver cualquier tipo de problema relacionado con la materia, aclarar dudas o buscar ayuda en la realización de las actividades propuestas, el alumnado puede solicitar en cualquier momento la atención del profesorado. Las sesiones de tutorización pueden llevarse a cabo de forma presencial en el despacho de los profesores o bien a través del campus remoto, a demanda del alumno. También se proporcionará atención personalizada a través del correo electrónico o de los foros de discusión en la plataforma de teledocencia.
Resolución de problemas	La resolución de problemas en grupos pequeños facilita la atención personalizada al alumno en el momento en el que aparezcan dificultades. Al igual que en el apartado anterior, se proporcionará atención personalizada en tutorías a demanda, así como a través del correo electrónico o los foros en la plataforma de teledocencia.
Prácticas de laboratorio	Durante las prácticas la mayor parte de los problemas individuales se resuelve directamente en el laboratorio. Al igual que en el apartado anterior, se proporcionará atención personalizada en tutorías a demanda, así como a través del correo electrónico o los foros en la plataforma de teledocencia.
Trabajo tutelado	

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Flipped Learning	El alumnado debe participar en las actividades realizadas en el aula e interactuar con los contenidos planificados en la plataforma de teledocencia. Se evaluará el resultado de los tests y otras actividades de comprobación integrados en cada lección en la plataforma.	10	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Resolución de problemas	Los alumnos deben resolver cuestiones, problemas y ejercicios, participando de forma activa en las sesiones presenciales y completándolas con trabajo autónomo. Se realizarán una serie de entregas que serán evaluadas. Se valorará la adecuación de las soluciones propuestas, la calidad de la argumentación utilizada y la presentación de la misma.	15	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19

Prácticas de laboratorio	Se evaluará la adquisición de las competencias asociadas al manejo seguro de sustancias químicas, a la evaluación de riesgos en el laboratorio, a la planificación y ejecución de experimentos (en el laboratorio y computacionales) y al análisis de resultados. Para ello se utilizarán la observación sistemática del trabajo del alumno, el trabajo previo a las sesiones de laboratorio y la calidad del cuaderno de laboratorio y del trabajo posterior. El trabajo de laboratorio será evaluado como APTO o NO APTO. La asistencia a las clases prácticas presenciales y la obtención de una calificación de APTO es obligatoria para superar la asignatura. Un 10% de la calificación final está asociada a la entrega de un trabajo asociado a las prácticas.	10				
Trabajo tutelado	Se realizarán a lo largo del curso pequeños trabajos en distintos formatos sobre los contenidos de la materia.	10				
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se realizarán tres pruebas que consistirán en la resolución de problemas y ejercicios: 1. Una prueba sobre los primeros temas de la asignatura (2 horas) que supondrá el 15% de la calificación final. 2. Una prueba sobre el temario completo (2 horas), que supondrá el 40% de la calificación final. Se exigirá una nota mínima de 4.0 puntos sobre 10 para superar la asignatura. 3. Una prueba escrita (0.5 horas), relacionada con la parte experimental de la materia, que supondrá un 10% de la calificación final. Se exigirá una nota mínima de 4.0 puntos sobre 10 para superar la materia.	55	A3 A4	B3 B4	C18 C19 C27 C28	D3

Otros comentarios sobre la Evaluación

Se establecen una serie de resultados de aprendizaje esenciales cuya adquisición completa el alumnado debe demostrar para superar la materia.

En caso de duda sobre la adquisición de los resultados de aprendizaje del alumnado, se puede establecer la realización de pruebas orales adicionales o complementarias a las pruebas escritas programadas.

CONDICIÓN DE PRESENTADO/A: La participación del alumnado en cualquiera de los actos de evaluación de la asignatura implicará la condición de presentado/a y, por tanto, la asignación de cualificación. Se consideran actos de evaluación la asistencia a clases prácticas de laboratorio, la entrega de trabajos y ejercicios entregados por el profesorado o la realización de alguna prueba.

ALUMNADO DE 2ª Y POSTERIORES MATRÍCULAS: Al estudiante evaluado con APTO/A en el trabajo de laboratorio en cursos anteriores que así lo solicite, se le otorgará la mención de APTO/A en el seguimiento del trabajo de laboratorio, no siendo necesaria su asistencia a las sesiones prácticas en este curso. Con todo, deberán realizar los entregables y la prueba escrita de la parte experimental para conseguir la calificación correspondiente a la parte experimental de la materia (20%) en el curso académico actual.

EVALUACIÓN DE LA SEGUNDA CONVOCATORIA: Se mantendrá la calificación obtenida por el alumnado durante el curso en la parte de resolución de problemas, flipped learning y prácticas de laboratorio. Se realizará una prueba sobre todos los contenidos teóricos de la materia que supondrá un 45% de la calificación final y una prueba escrita sobre la parte experimental que supondrá un 10% de la calificación final. Será necesario obtener un mínimo de 4 puntos sobre 10 en ambas pruebas para superar la asignatura y tener en cuenta el resto de elementos de la evaluación.

OPCIÓN DE EVALUACIÓN NO CONTINUA: El alumnado que no desee optar a la evaluación continua deberá realizar las prácticas de laboratorio y obtener una cualificación de APTO/A en las mismas, además de obtener una calificación superior a 5 puntos sobre 10 en la prueba escrita relativa a la parte experimental de la materia (un 20% de la calificación). Aparte de ello, deberá obtener como mínimo una calificación de 5 puntos sobre 10 en una única prueba en la que se evaluarán todos los contenidos de la materia (un 80% de la calificación).

Fuentes de información

Bibliografía Básica

Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty, **Modern physical organic chemistry**, University Science Books, 2006

Felix A. Carroll, **Perspectives on structure and mechanism in organic chemistry**, John Wiley, 2010
John Perkins, **Radical chemistry : the fundamentals**, Oxford University Press, 2000
Ian Fleming, **Pericyclic reactions**, Oxford University Press, 1999
Carol E. Wayne, Richard P. Wayne, **Photochemistry**, Oxford University Press, 1996
Steven M. Bachrach, **Computational organic chemistry**, John Wiley & Sons,, 2007
James W. Zubrick, **The Organic Chem Lab Survival Manual: a student's guide to techniques**, John Wiley & Sons, 2009
Jerry R. Mohrig ... [et al.], **Laboratory techniques in organic chemistry : supporting inquiry-driven experiments**, W.H. Freeman, 2014

Bibliografía Complementaria

Nicholas J. Turro, V. Ramamurthy, J.C. Scaiano, **Modern molecular photochemistry of organic molecules**, University Science Books, 2010
Ernö Pretsch, Philippe Buhlmann, Martin Badertscher, **Structure determination of organic compounds : tables of spectral data**, Springer,, 2009
Chemistry Libre Texts, **ChemistryLibre Texts**, ookshelves/Organic_Chemistry,
James Ashenurst, **MasterOrganicChemistry**, <https://www.masterorganicchemistry.com/>,

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Química orgánica IV: Diseño de la síntesis orgánica/V11G201V01310

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Química física III: Química cuántica/V11G201V01303

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Determinación estructural/V11G201V01206

Química orgánica I/V11G201V01205

Química orgánica II/V11G201V01210

Otros comentarios

Los objetivos del curso implican aprender a manejar con soltura un buen número de conceptos nuevos en un período de tiempo relativamente corto, por lo que el trabajo y estudio diario son imprescindibles. Lo mismo aplica a la asistencia a clase y participación activa en todas las actividades propuestas, incluyendo la interacción con los materiales que se ponen a disposición del alumnado a través de la plataforma o la lectura de los temas designados antes de cada sesión presencial.

Se recomienda fuertemente haber aprobado previamente Química Orgánica I y II y Determinación Estructural, pues a lo largo de este curso se hará uso constante de los conceptos trabajados en esas asignaturas.

Se recomienda la utilización de modelos moleculares, ya que una de las principales dificultades del curso es la visualización de la estructura tridimensional de las moléculas.

Para las prácticas es necesaria una bata de laboratorio y un cuaderno.