



DATOS IDENTIFICATIVOS

Estrutura e Reactividade dos Compostos Orgánicos

Materia	Estrutura e Reactividade dos Compostos Orgánicos			
Código	V11M162V01114			
Titulación	Máster Universitario en Investigación Química e Química Industrial			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	3	OP	1	An
Lingua de impartición	Castelán Galego Inglés			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Iglesias Antelo, María Beatriz Tojo Suárez, Emilia			
Profesorado	Iglesias Antelo, María Beatriz Tojo Suárez, Emilia			
Correo-e	bantelo@uvigo.es etojo@uvigo.es			
Web	http://www.usc.es/gl/centros/quimica/materia.html?materia=129475			
Descrición xeral	Nesta materia preténdese revisar os principais mecanismos das reaccións orgánicas e os métodos empregados na súa determinación. Ademais de profundar nos efectos que a estrutura tridimensional dos compostos orgánicos exerce sobre a súa reactividade. E analizar a estrutura, xeración e evolución dos intermedios de reacción.			

Competencias

Código	
A1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, adoitado nun contexto de investigación.
A2	Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
A4	Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións, e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan, a públicos especializados e non especializados dun xeito claro e sen ambigüidades.
A5	Que os estudantes posúan as habilidades de aprendizaxe que lles permitan continuar estudando dun xeito que terá que ser, en grande medida, autodirixido e autónomo.

Resultados de aprendizaxe

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Coñecer de forma completa e integrada os principais mecanismos das reaccións orgánicas.	A1 A2
Coñecer os principais métodos empregados na determinación do mecanismo dunha reacción en Química Orgánica.	A1 A2
Comprender os efectos estereoelectrónicos na reactividade dos compostos orgánicos e en procesos de formación de ciclos.	A1 A2 A4 A5
Entender o efecto da conformación dos compostos acíclicos e cíclicos na súa reactividade e o Principio de Curtin-Hammett.	A1 A2

Ser quen de analizar, de forma integrada, a xeración, a estrutura e a evolución dos intermedios de reacción.

A1
A2
A4

Coñecer os principios e as metodoloxías sintéticas baseadas en reaccións pericíclicas.

A1
A2
A5

Contidos

Tema

1. Determinación de mecanismos de reacción	Mecanismos de reacción. Principais tipos de reacción. Ferramentas para a determinación de mecanismos de reacción: identificación dos produtos de reacción; marcaxe isotópico; experimentos de cruce ("crossover"); correlación de estrutura e reactividade, a ecuación de Hammett; estudos cinéticos, efecto isotópico cinético; detección dos intermedios de reacción; estudos estereoquímicos. Exemplo práctico: a reacción de Cannizzaro.
2. Análise conformacional e reactividade química	Conformación e configuración. Control estereoquímico en aneis de seis membros. Reaccións en aneis de catro e cinco membros. Estereoselectividade en compostos bicíclicos. Reaccións con intermedios ou estados de transición cíclicos. Reaccións estereoselectivas en compostos acíclicos: adicións a carbonilos; reaccións de epoxidación; reaccións aldólicas.
3. Formación, estrutura e reactividade dos intermedios de reacción	Tipos de intermedios de reacción. Reaccións radicalarias: métodos de iniciación. Tipos de reaccións radicalarias. Reaccións en cadea. Reaccións radicalarias en síntese. Carbenos, nitrenos e arinos. Estrutura e reactividade. Xeración. Reaccións de carbenos. Reaccións de nitrenos. Reaccións de arinos.
4. Reaccións pericíclicas	Reaccións de cicloadición. Aspectos xerais da reacción de Diels-Alder (dieno, dienófilo, ciclooadutor, estereoquímica, regra endo). Descrición mediante a teoría do orbital fronteira. Rexioselectividade nas reaccións de Diels-Alder. As regras de Woodward e Hoffman. Outras reaccións de cicloadición: a reacción énica. Reaccións de cicloadición [2+2]. Reaccións de cicloadición 1,3-dipolares: formación de aneis de cinco membros. Reaccións electrocíclicas. Aspectos xerais: procesos conrotatorios e disrotatorios. Regras de Woodward e Hoffman. Reaccións electrocíclicas cun número impar de átomos: reaccións de catións e anións, apertura de aneis pequenos. Reaccións fotoquímicas. Reaccións sigmatrópicas. Aspectos xerais: a transposición de Claisen. Descrición orbital das reaccións sigmatrópicas [3,3]. Aspectos rexioquímicos da reacción [3,3]. Reaccións sigmatrópicas [2,3]. Desprazamentos sigmatrópicos de hidróxeno.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	12	20	32
Seminario	7	20	27
Titoría en grupo	2	4	6
Probos de resposta curta	2	8	10

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	Clases expositivas con emprego de medios audiovisuais, complementadas coas ferramentas propias da docencia virtual.
Seminario	Sesións interactivas de resolución de exercicios, debates e intercambio de opinións co alumnado.
Titoría en grupo	Sesións interactivas de apoio ao traballo do estudantado.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Seminario	
Titoría en grupo	

Avaliación

Descripción	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Lección maxistral	5	A1
Seminario	35	A1 A2 A4 A5
Probas de resposta curta	60	A1 A2 A4

Outros comentarios sobre a Avaliación

Para superar a materia o estudiantado terá que acadar unha puntuación mínima de 5 sobre 10 puntos.

Se non acada a puntuación mínima na primeira oportunidade, poderá realizar, en xullo, unha nova proba de resposta curta (60%), cuxa cualificación substituirá á conseguida na ocasión anterior.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S., **Organic Chemistry**, 2nd edition, Oxford University Press, 2012

Carey, F. A.; Sundberg, R. J., **Advanced Organic Chemistry**, 5th edition, Springer-Verlag, 2007

Bibliografía Complementaria

Miller, B., **Advanced Organic Chemistry: Reactions and Mechanisms**, Prentice-Hall, 1998

Sykes, P. A., **Guidebook to Mechanism in Organic Chemistry**, 6th edition, Longman Group Ltd., 1986

Moody, C. J.; Whitham, G. H., **Reactive Intermediates**, Oxford Science Publications, 1992

Fleming, I., **Pericyclic Reactions**, Oxford Science Publications, 1999

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Aplicacións Sintéticas dos Compostos Organometálicos/V11M162V01112

Química de Coordinación Aplicada/V11M162V01110

Química Organometálica/V11M162V01111

Síntese Estereoselectiva/V11M162V01113