FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura	
Codi	44705
Nom	Química orgànica avançada
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	4.0
Curs acadèmic	2021 - 2022

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2226 - M.U. en Química Orgànica	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2226 - M.U. en Química Orgànica	1 - Química orgànica avançada	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgànica

RESUM

La “Química Orgànica Física” (2 crèdits) juntament amb Fotoquímica (2 crèdits) constitueixen la matèria Química Orgànica Avançada (I). Aquesta materia proporciona un aprofundiment en diferents aspectes de la Química Orgànica que ja s'han estudiat amb anterioritat, amb la finalitat de situar a l'alumne en condicions per a abordar aspectes més complexos de la Química Orgànica, especialment en aquells que resulten d'interès en la indústria Química o Farmacèutica.

En aquesta assignatura es tracta d'avançar en el coneixement de l'enllaç químic i en diferents tòpics relacionats amb el coneixement teòric de les reaccions pericícliques, incloent les reaccions electrocícliques, cicloaddicions i transposicions sigmatròpiques. També s'estudia la teoria de les pertorbacions com una eina per a explicar la selectivitat de les reaccions

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Coneixements de Química Orgànica i Química Física a nivell de grau

COMPETÈNCIES

2226 - M.U. en Química Orgànica

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d?estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d?integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d?una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l?aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d?una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d?aprenentatge que els permeten continuar estudiant d?una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Utilitzar les diferents tècniques d'exposició-oral, escrita, presentacions, panells, etc-per comunicar els seus coneixements, propostes i posicions.
- Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.
- Saber participar en debats i discussions, dirigir-los i coordinar-los i ser capaços de resumir-los i extraure d'ells les conclusions més rellevants i acceptades per la majoria.
- Posseir habilitats socials, un bon nivell de comunicació oral i escrita, així com capacitat per a treballar en equip i amb persones de diferents procedències.
- Competències de gestió com ara la capacitat per a la planificació i gestió de temps i recursos, així com per a dirigir i prendre decisions.
- Ser capaços de valorar la necessitat de completar la seua formació científica, en llengües, en informàtica, assistint a conferències o cursos i/o realitzant activitats complementàries, autoavaluant l'aportació que la realització d'estes activitats suposa per a la seua formació integral.

- Refermar i aprofundir en aquells temes relacionats amb l'estereoquímica de les molècules orgàniques i la descripció de l'enllaç químic.
- Aconseguir un coneixement profund dels aspectes teòrics de les reaccions pericíclicas.
- Conéixer els fonaments de les reaccions fotoquímiques, en especial dels compostos orgànics, i les seues aplicacions en síntesi.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

Els resultats a aconseguir en aquesta assignatura són:

- Un coneixement profund en aspectes de la Química Orgànica que ja s'han estudiat amb anterioritat, amb la finalitat de situar a l'alumne en condicions per a abordar aspectes més complexos de la Química Orgànica.

- Un domini d'aspectes d'aplicació de la Química Orgànica d'interès en la indústria Química o Farmacèutica.

En concret, els objectius a aconseguir en aquesta assignatura són:

-Afermar i aprofundir coneixements sobre tòpics relacionats amb la estereoquímica de les molècules orgàniques i la descripció de l'enllaç químic.

- Afermar i aprofundir els aspectes físic-químics de les reaccions orgàniques.

- Aconseguir un major coneixement sobre els aspectes teòrics de les reaccions pericícliques i les seues aplicacions en síntesi.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Estructura i enllaç

Descripció tècnica del enllaç químic. Teoria dorbitals moleculars. Conjugació . Hiperconjugació. Orbitales moleculars localitzats. Interaccions no covalents. Efectes estereoelectrònics. Conformacions

2. Teoria de les pertorbacions

Reactivitat química: teoria de les pertorbacions. Equació de Salem-Klopman. Intermedis reactius. Reaccions iòniques, radicalàries i pericícliques.

3. Reaccions electrocíclicas

Reaccions electrocícliques. Moviments conrotatorio i disrotatorio. diagrames de correlació: regles de selecció. Aproximació dels orbitals de frontera. Aproximació del estat del transició aromàtic.

4. Cicloadiciones

Cicloadiciones. Regles de selecció. Reacció de Diels-Alder: regi i estereoselectivitat. Cicloadiciones 1,3-dipolars.

5. Transposicions sigmatrópicas

Transposicions sigmatrópicas. Migracions [1, j] d'hidrogen. Migracions [1, j] d'altres grups. Transposicions sigmatrópicas [3,3]: transposicions de Claisen i Cope. Transposicions sigmatrópicas [2,3] en sistemes aniònics. Reaccions eno i retroeno. Regles de selecció.

6. Fotoquímica

Lleis bàsiques. Processos primaris i secundaris. Característiques de les reaccions fotoquímiques

7. Estats excitats

Propietats estàtiques i dinàmiques dels estats excitats. Transicions radiatives i no radiatives. Processos de transferència d'energia. Processos de transferència de càrrega.

8. Aspectes experimentals

Fonts de llum. Reactors fotoquímics. Selecció de la longitud d'ona.

9. Fotoquímica del grup carbonil

Introducció. Reacció Norrish I. Abstracció d'hidrogen. Reacció Norrish II. Paterno Buchi.

10. Fotoquímica d'alquens

Introducció. Isomerització Z-E. Transposició di--metano. Transposicions sigmatrópicas i via carbens.

11. Fotoquímica de compostos aromàtics

Introducció. Isomerització d'anell. Fotoaddicions. Fotocicloaddicions. Fotodimerizaciones. Fotosubstitució aromàtica. Fotociclaciones. Reaccions de la cadena lateral.

12. Fotoquímica de compostos nitrogenats

Imines. Sales de Imini. Òxids i compostos relacionats. Nitrits. Nitrocompuestos. Azocompuestos. Diazocompostos. Azides.

13. Fotooxigenaciones

Espècies reactives d'oxigen. Oxigenaciones amb oxigen triplet. Oxigenaciones amb oxigen singlet. Oxidacions amb oxigen anió radical.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	20,00	100
Seminaris	20,00	100
TOTAL	**40,00**	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura està plantejada perquè l'estudiant siga el protagonista del seu propi aprenentatge i des del principi de curs els estudiants disposaran de tot el material didàctic corresponent al curs.

La metodologia emprada combinarà classes presencials, discussió i anàlisi d'exemples seleccionats i/o casos pràctics així com la utilització de mitjans audiovisuals i altres recursos electrònics.

La docència s'estructura de la següent manera:

Classes magistrals (presencials).- En aquestes classes s'introduiran els conceptes bàsics i les perspectives de la Química Orgànica Física . En elles, s'exposaran els continguts fonamentals de cada tema .

Seminaris.- Aquesta activitat docent estarà dedicada a la resolució de problemes i qüestions amb la participació activa de l'estudiant. Es preveu també la discussió d'articles científics relacionats amb els temes estudiats.

Treballs.- Addicionalment, quan el professor ho considere oportú, es proposaran treballs relacionats amb algun dels temes del programa i descrits en una publicació científica

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'assignatura es durà a terme d'una forma contínua per part del professorat al llarg del curs i constarà dels següents apartats.

Avaluació directa del professor. Un 15% de la nota procedirà de l'avaluació directa del professor en les classes de teoria i en els seminaris. En aquesta avaluació es tindran en compte diferents aspectes, entre els quals cal destacar:

•Assistència i participació raonada i clara en les discussions plantejades.

•Progrés en l'ús del llenguatge propi de la química orgànica física.

•Resolució de problemes i plantejament de dubtes.

•Esperit crític.

•Lliurament d'exercicis o treballs.

Avaluació del treball realitzat per l'estudiant. Es tindrà en compte tant el contingut com la forma . A aquest apartat li correspondrà un 25% de la nota final.

Exàmens i proves escrites. Un 60% de la nota s'obtindrà a partir dels resultats de les proves escrites.

•Exàmens presencials d'estil tradicional tant de qüestions teòriques com de problemes, i de continguts relacionats amb la matèria. Aquestes qüestions i problemes seran de tal naturalesa que obliguen a l'estudiant a relacionar aspectes diferents que apareguen en diferents temes de l'assignatura.

•Exàmens no presencials en els quals el professor lliura directament, o bé envia mitjançant correu electrònic, una sèrie de qüestions que hauran de ser resoltes pels estudiants. L'estudiant haurà d'enviar les respostes al professor pel mateix conducte abans esmentat i en el termini que aquest professor establisca.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Principles of Molecular Photochemistry: An Introduction, N.J. Turro, J.C. Scaiano, V. Ramamurthy, University Science Books, 2009.
- Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules, N.J. Turro, J.C. Scaiano, V. Ramamurthy, University Science Books, 2010.
- CRC Handbook of Organic Photochemistry and Photobiology (2 volúmenes), 3rd Edition, Editado por A. G. Griesbeck, M. Oelgemöller y F. Getti, CRC Press, 2012.

Complementàries

- Glosario de Términos Usados en Fotoquímica. Comisión de Fotoquímica de la IUPAC, 1996. Universitat Autònoma de Barcelona. Servei de Publicacions Bellaterra, 1999.

ADDENDA COVID-19

Aquesta addenda només s'activarà si la situació sanitària ho requereix i previ acord del Consell de Govern

- **Segona convocatòria**

Amb motiu de la no presencialitat imposada per la *situacion sanitària, l'avaluació de la segona convocatòria es realitzarà de forma no presencial. L'assignatura ja havia acabat les seues classes presencials i s'havia efectuat l'avaluació presencial de la primera convocatòria quan es va decretar l'estat d'alarma.

Per a això s'utilitzaran les eines de què disposa la plataforma Aula Virtual de la UVEG. De la mateixa forma, la integritat dels exàmens serà verificada amb el programari que proporcione la UVEG. L'alumne s'identificarà amb les seues claus per a accedir a l'aula virtual.