



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química orgánica III: Reacciones concertadas, radicalarias e fotoquímicas

Materia	Química orgánica III: Reaccións concertadas, radicalarias e fotoquímicas			
Código	V11G201V01305			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	1c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Castelán Galego			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Nieto Faza, Olalla			
Profesorado	Gómez Bouzón, Uxía Gómez Pacios, María Generosa Nieto Faza, Olalla Silva López, Carlos			
Correo-e	faza@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Nesta materia estudaranse procesos radicalarios, pericíclicos e fotoquímicos mediante unha aproximación organizada arredor dos seus mecanismos e selectividade. A metodoloxía, centrada na resolución de problemas, inclúe prácticas de laboratorio e modelización molecular.			
	Materia do programa English Friendly: O alumnado internacional poderá solicitar ó profesorado a) materiais e referencias bibliográficas para seguir a materia en inglés, b) atención en inglés nas titorías e c) probas e avaliacións en inglés.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A3	Que os estudantes teñan a capacidade de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro da súa área de estudo) para emitir xuízos que inclúan unha reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica ou ética
A4	Que os estudantes poidan transmitir información, ideas, problemas e solución a un público tanto especializado coma non especializado
B3	Capacidade de xestión da información
B4	Capacidade de análise e síntese
C18	Cóñecer as propiedades dos compostos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos e organometálicos
C19	Cóñecer as principais rutas de síntese na química orgánica, incluíndo as interconversións de grupos funcionais e a formación dos enlaces carbono-carbono e carbono-heteroátomo
C27	Demostrar capacidade para a observación, o seguimento e a medida dos procesos químicos, mediante o seu rexistro sistemático e fiable e a presentación de informes do traballo realizado
C28	Interpretar os datos derivados das observacións e medidas do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
D3	Capacidade para comunicarse de forma oral e escrita en castelán e/ou galego e/ou inglés

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Cóñecer e aplicar os factores que afectan á estabilidade de radicais orgánicos.	A3	B3	C18	D3
	A4	B4	C19	
Recoñecer e comprender mecanismos de reacción radicalarios e utilizar ese coñecemento para propoñer estratexias para evitalos ou explotalos.	A3	B3	C18	D3
	A4	B4	C19	
Utilizar as regras de Woodward-Hoffmann para diferenciar entre camiños de reacción permitidos e prohibidos en reaccións pericíclicas.	A3	B3	C18	D3
	A4	B4	C19	

Recoñecer os mecanismos pericíclicos máis comúns (electrociclacións, cicloadicións, reaccións sigmatrópicas e énicas) e utilízaos en secuencias sintéticas.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Predicir a rexio e estereoselectividade de reaccións pericíclicas.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Comprender os mecanismos de activación fotoquímica de moléculas orgánicas.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Comprender e aplicar os mecanismos de reaccións fotoquímicas: isomerizacións de dobre enlace, fotodisociacións, fotorreducións e reaccións pericíclicas.	A3 A4	B3 B4	C18 C19	D3
Levar a cabo reaccións pericíclicas, radicalarias e fotoquímicas e elaborar, separar e purificar os seus produtos mediante técnicas habituais.	A3 A4	B3 B4	C18 C19 C27 C28	D3
Utilizar técnicas espectroscópicas para determinar a estrutura de compostos orgánicos.	A3 A4	B3 B4	C18 C27 C28	D3
Utilizar ferramentas de modelización molecular para estudar as propiedades de compostos orgánicos e mecanismos de reacción.	A3 A4	B3 B4	C18 C19 C27 C28	D3

Contidos

Tema	
Tema 1. Mecanismos de reacción	1.1. Mecanismo de reacción. Perfís de reacción e teoría do estado de transición. 1.2. Forza condutora da reacción. Teoría dos orbitais fronteira. 1.3. Tipos de selectividade en transformacións orgánicas. 1.4. Clasificacións de mecanismos.
Tema 2. Reaccións radicalarias	2.1. Rotura homolítica vs. rotura heterolítica de enlaces. 2.2. Estabilidade de radicais. 2.3. Reaccións en cadea, haloxenación de alcanos. 2.4. Polimerizacións radicalarias. 2.5. Reducións e acoplamentos redutivos radicalarios 2.6. Reaccións radicalarias na natureza
Tema 3. Reaccións pericíclicas	3.1. Reglas de Woodward-Hoffmann. Conservación da simetría orbital e aromaticidade do estado de transición. Reaccións permitidas e prohibidas térmicas e fotoquímicas. 3.2. Electrociclacións. 3.3. Cicloadicións. Teoría dos orbitais fronteira. 3.4. Reaccións sigmatrópicas e énicas.
Tema 4. Reaccións fotoquímicas	4.1. Espectros UV/vis de moléculas orgánicas. Propiedades dos estados excitados. 4.2. Procesos fotofísicos: desactivación unimolecular, conversión interna, cruces entre sistemas, emisión (fluorescencia, fosforescencia) 4.3. Isomerización de dobre enlace. 4.4. Fotodisociacións. 4.5. Fotorreducións. 4.6. Reaccións pericíclicas. 4.7. Reaccións fotoquímicas na natureza.
Tema 5. Prácticas de laboratorio	Nestas sesións levaranse a cabo experimentos relacionados cos temas anteriores. Síntese, purificación e caracterización de compostos orgánicos.
Tema 6. Prácticas de modelización molecular	Empregaranse as ferramentas da química computacional para estudar as propiedades de moléculas orgánicas e mecanismos de reacción relacionados cos temas anteriores.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Actividades introductorias	0	2	2
Flipped Learning	12	20	32
Resolución de problemas	24	44	68
Prácticas de laboratorio	28	10	38
Traballo tutelado	0	8	8
Resolución de problemas e/ou exercicios	2	0	2

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Actividades introductorias	Presentación da materia e o profesorado, revisión da guía docente e da estrutura do curso na plataforma de teledocencia.
Flipped Learning	Requírese a interacción do alumnado cos materiais postos á súa disposición a través da plataforma de teledocencia e a realización das actividades propostas para preparar as sesións presenciais. Na aula levaranse a cabo diversas actividades de consolidación, revisión, aclaración e aplicación dos conceptos estudados.
Resolución de problemas	Realízanse exercicios prácticos de aplicación dos conceptos desenvolvidos nas sesións de aula invertida.
Prácticas de laboratorio	Posta en práctica no laboratorio das técnicas básicas de síntese, separación, purificación e determinación estrutural de compostos orgánicos. O traballo inclúe a avaliación de riscos, planificación dos experimentos e análise dos resultados. Empregaranse técnicas de modelización molecular para estudar as propiedades de compostos orgánicos e os mecanismos de reaccións seleccionadas. Para poder acceder ás sesións de prácticas requírese un traballo previo de preparación a través da plataforma de teledocencia. O traballo levarase a cabo de forma individual en sesións de 3.5 horas, e será documentado nun caderno de laboratorio. Tras as sesións de prácticas, elaborárase un traballo de acordo coas instrucións do profesorado.
Traballo tutelado	

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Flipped Learning	A avaliación continua proporciona tanto ó profesorado coma ó alumnado un rexistro da evolución da súa aprendizaxe ó longo do curso. Aínda que o profesorado pode tomar a iniciativa de propoñer sesións tutoriais se aprecia risco, recoméndase que o alumnado use esa información para identificar fortalezas e debilidades, organizar o seu traballo e buscar o apoio que precise. Para resolver calquera problema relacionado coa materia, aclarar dúbidas ou buscar axuda na realización das actividades propostas, o alumnado pode solicitar en calquera momento a atención do profesorado. As sesións de tutorización poden levarse a cabo de forma presencial, no despacho dos profesores, ou ben a través do campus remoto, a demanda do alumno. Tamén se proporcionará atención personalizada a través do correo electrónico ou dos foros de discusión na plataforma de teledocencia.
Resolución de problemas	A resolución de problemas en grupos pequenos facilita a atención personalizada ó alumno no momento no que aparezan dificultades. Do mesmo xeito que no apartado anterior, proporcionarase atención personalizada en tutorías a demanda, así como a través do correo electrónico ou os foros na plataforma de teledocencia.
Prácticas de laboratorio	Durante as prácticas, a maior parte dos problemas individuais resolverase directamente no laboratorio. Do mesmo xeito que no apartado anterior, proporcionarase atención personalizada en tutorías a demanda, así como a través do correo electrónico ou os foros na plataforma de teledocencia.
Traballo tutelado	

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Flipped Learning	O alumnado debe participar nas actividades realizadas na aula e interactuar cos contenidos planificados na plataforma de teledocencia. Avaliarase o resultado dos tests e outras actividades de comprobación integradas en cada lección na plataforma.	10	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Resolución de problemas	Os alumnos deben resolver cuestións, problemas e exercicios, participando de forma activa nas sesións presenciais e completándoas con traballo autónomo. Realizaranse unha serie de entregas que serán avaliadas. Valorarase a adecuación das solucións propostas, a calidade da argumentación utilizada e a presentación da mesma.	15	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19

Prácticas de laboratorio	Avaliarase a adquisición das competencias asociadas ó manexo seguro de substancias químicas, á avaliación de riscos no laboratorio, á planificación e execución de experimentos (no laboratorio e computacionais) e á análise de resultados. Para iso, empregaranse a observación sistemática do traballo do alumno, o traballo previo ás sesións de laboratorio e a calidade do caderno de laboratorio. O traballo de laboratorio será cualificado como APTO ou NON APTO. A asistencia ás clases prácticas presenciais e a obtención dunha cualificación de APTO é obrigatoria para superar a materia. Un 10% da cualificación final está asociada á entrega dun traballo asociado ás prácticas.	10				
Traballo tutelado	Realizaranse ó longo do curso pequenos traballos en distintos formatos sobre os contidos da materia.	10				
Resolución de problemas e/ou exercicios	Realizaranse tres probas que consistirán na resolución de problemas e exercicios: 1. Unha proba sobre os primeiros temas da materia (2 horas) que suporá o 15% da cualificación final. 2. Unha proba final sobre todo o temario (2 horas) que suporá o 30% da cualificación final. Esixirase unha nota mínima de 4.0 puntos sobre 10 nesta proba para superar a materia. 3. Unha proba escrita (0.5 horas) relacionada coa parte experimental da materia, que suporá un 10% da cualificación final. Esixirase unha nota mínima de 4.0 puntos sobre 10 nesta proba para superar a materia.	55	A3 A4	B3 B4	C18 C19 C27 C28	D3

Outros comentarios sobre a Avaliación

Establécense unha serie de resultados de aprendizaxe esenciais que o estudantado debe demostrar ter adquirido de forma completa para superar a materia.

En caso de dúbida sobre a adquisición dos resultados de aprendizaxe do alumnado, pódese establecer a realización de probas orais adicionais ou complementarias ás probas escritas programadas.

CONDICIÓN DE PRESENTADO/A: A participación do/a estudante nalgún dos actos de avaliación da materia implicará a condición de presentado/a e, polo tanto, a asignación dunha cualificación. Considéranse actos de avaliación a asistencia a clases prácticas de laboratorio, a entrega de traballos e exercicios encargados polo profesorado, ou a realización dalgunha proba.

ALUMNADO DE 2ª E POSTERIORES MATRÍCULAS: Ó/á estudante avaliado como APTO/A no traballo de laboratorio en cursos anteriores que así o solicite, outorgaráselle mención de APTO/A no seguimento do traballo de laboratorio, non sendo necesaria a súa asistencia ás sesións prácticas neste curso. Con todo, deberán realizar os entregables e a proba escrita da parte experimental para conseguir a cualificación correspondente á parte experimental da materia (20%) no curso académico actual.

AVALIACIÓN DA SEGUNDA CONVOCATORIA: Manterase a cualificación obtida polo alumnado durante o curso na parte de resolución de problemas, flipped learning, traballos tutelados e prácticas de laboratorio. Realizarase unha proba sobre todos os contidos teóricos da materia, que suporá un 45% da cualificación final e unha proba escrita sobre a parte experimental que suporá un 10% da cualificación final. Será necesario obter un mínimo de 4.0 puntos sobre 10 en cada unha destas probas para superar a materia e ter en conta o resto de elementos da avaliación.

OPCIÓN DE AVALIACIÓN NON CONTINUA: O alumnado que non desexe optar á avaliación continua deberá realizar as prácticas de laboratorio e obter unha cualificación de APTO nas mesmas, ademais de obter unha cualificación superior a 5.0 puntos sobre 10 na proba escrita relativa á parte experimental da materia (un 20% da calificación). Aparte disto, deberá obter como mínimo unha cualificación de 5.0 puntos sobre 10 nunha única proba na que se avaliarán todos os contidos da materia (un 80% da calificación).

Bibliografía. Fontes 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 Bühlmann, Martin Badertscher, **Structure determination of organic compounds : tables of spectral data**, Springer,, 2009

Chemistry Libre Texts, **ChemistryLibre Texts**, [ookshelves/Organic_Chemistry](https://www.masterorganicchemistry.com/),

James Ashenurst, **MasterOrganicChemistry**, <https://www.masterorganicchemistry.com/>,

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Química orgánica IV: Deseño da síntese orgánica/V11G201V01310

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Química física III: Química cuántica/V11G201V01303

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Determinación estrutural/V11G201V01206

Química orgánica I/V11G201V01205

Química orgánica II/V11G201V01210

Outros comentarios

Os obxectivos do curso implican aprender a manexar con soltura un bo número de conceptos novos nun período de tempo relativamente curto, polo que o traballo e estudo diarios son imprescindibles. O mesmo aplica á asistencia a clase e participación activa en todas as actividades propostas, incluíndo a interacción cos materiais que se poñen a disposición do alumnado a través da plataforma ou a lectura dos temas designados antes de cada sesión presencial.

Recoméndase fortemente ter aprobado previamente Química Orgánica I e II e Determinación Estrutural pois durante este curso farase uso constante dos conceptos traballados nesas materias.

Recoméndase a utilización de modelos moleculares, xa que unha das principais dificultades do curso é a visualización da estrutura tridimensional das moléculas.

Para as prácticas, son necesarios unha bata de laboratorio e un caderno.
