

**GUIA DOCENTE DE LA ASIGNATURA
DESCRIPTION OF INDIVIDUAL COURSE UNIT**

Nombre de la asignatura/módulo/unidad y código Course title and code	Química Orgánica Teórica
Nivel (Grado/Postgrado) Level of course (Undergraduate/Postgraduate)	Grado
Plan de estudios en que se integra Programme in which is integrated	Licenciado En Química
Tipo (Troncal/Obligatoria/Optativa) Type of course (Compulsory/Elective)	Optativa
Año en que se programa year of study	5
Calendario (Semestre) Calendar (Semester)	Primer cuatrimestre: _____
Créditos teóricos y prácticos Credits (theory and practics)	4.5(T)+1.5(P)
Créditos expresados como volumen total de trabajo del estudiante (ECTS) Number of credits expressed as student workload (ECTS)	6* 1 ECTS= 25-30 horas de trabajo. ver más abajo actividades y horas de trabajo estimadas
Descriptor Descriptors	Cálculos Moleculares en Química Orgánica. Determinación de Mecanismos de Reacción. Estudio de las Reacciones Pericíclicas y Fotoquímicas.
Objetivos (expresados como resultados de aprendizaje y competencias) Objectives of the course (expressed in terms of learning outcomes and competences)	Conocimiento de los aspectos teóricos que permiten la formulación de modelos cuantitativos con valor predictivo en química orgánica, así como, su aplicación a la comprensión de la estructura y reactividad de las moléculas orgánicas. Estudio de los fundamentos de las reacciones pericíclicas y fotoquímicas.
Prerrequisitos y recomendaciones Prerequisites and advises	
Contenidos/descriptores/palabras clave Course contents/descriptors/key words	
Bibliografía recomendada Recommended reading	Tema 1: métodos químico-cuánticos (i) Introducción. Teoría de orbitales moleculares (TOM). Interpretación de resultados. Correlación electrónica. Métodos post-Hartree-Fock Tema 2: métodos químico-cuánticos (ii) Métodos de electrones independientes. Métodos semiempíricos. Métodos de funcionales de la densidad (DFT)

Tema 3: métodos de mecánica-clásica

Modelización molecular. Mecánica molecular. Análisis conformacional. Métodos híbridos de mecánica cuántica/mecánica clásica (QM/MM). Limitaciones de los métodos de mm

Tema 4:

herramientas para el estudio de mecanismos de reacción

Efectos de sustituyente. Correlaciones lineales de energía libre. Concepto de ácidos duros y blandos. Efecto isotópico

Tema 5: intermedios de reacción

Intermedios de reacción con carbonos neutros y deficientes en electrones (radicales, carbenos).

Intermedios con átomos de carbono cargados (carbocationes, carbaniones)

Tema 6: teoría de las reacciones pericíclicas

Introducción. Transformaciones electrocíclicas. Reacciones sigmatrópicas. Reacciones de cicloadición. Otras reacciones concertadas. Regla de selección generalizada para las reacciones pericíclicas. Modelos conceptuales alternativos para las reacciones concertadas

Tema 7: reacciones fotoquímicas

Introducción. Propiedades de los estados excitados. Reacciones fotoquímicas representativas. Algunas aplicaciones de fotoquímica orgánica.

Práctica 1.- Formas de descripción de la estructura molecular. Sistemas de coordenadas. Coordenadas internas y cartesianas. Ventajas e inconvenientes. Ejemplos de construcción de una matriz-z.

Práctica 2.- Descripción del programa de cálculo

de Orbitales Moleculares ab initio (Gaussian).
Ficheros de entrada y salida. Cálculos de
sistemas sencillos. Comparaciones de los niveles
y las funciones de base utilizados.

Práctica 3.- Visualización gráfica de resultados
de un cálculo de OM mediante el programa
Molekel.

Práctica 4.- Descripción de programas de
Modelización Molecular. El programa
HyperChem. Descripción general.

Práctica 5.- Construcción de moléculas sencillas.
Optimización molecular de geometrías mediante
Mecánica Molecular. Análisis conformacional en
sistemas de cadena abierta y en sistemas
cíclicos. Cálculo de ctes de acoplamiento 3JH,H.

Práctica 6.- Construcción del diagrama de la
coordenada de reacción para una sustitución
nucleófila alifática bimolecular.

Práctica 7.- Estudio de la regioselectividad en la
reacción de Diels-Alder mediante la comparación
de los orbitales frontera de diferentes dienos y
dienófilos.

Práctica 8.- Estudio de iones carbenio.
Hiperconjugación y estabilización de cationes
alilo.

Métodos docentes Teaching methods

La metodología docente usada en las clases
teóricas es de naturaleza expositiva por parte del
profesor. En las prácticas, el profesor explicará
brevemente los guiones de las mismas y los
alumnos las desarrollaran en sus
correspondientes ordenadores (aula de
informática equipada con los correspondientes
programas de cálculo de OM). En todo momento,
los alumnos estarán guiados en las partes más
dificiles del manejo de dichos programas
informáticos.

Actividades y horas de trabajo estimadas Activities and estimated workload (hours)

Tipo de evaluación y criterios de calificación Assessment methods	Conocimientos teóricos del temario de teoría (70% nota final). Conocimientos prácticos del manejo de programas de cálculo de OM y mecánica molecular así como la aplicación a moléculas y reacciones orgánicas sencillas. (30% nota final)
Idioma usado en clase y exámenes Language of instruction	Español
Enlaces a más información Links to more information Nombre del profesor(es) y dirección de contacto para tutorías Name of lecturer(s) and address for tutoring	<hr/> José Antonio Dobado Jiménez Correo electrónico: dobado@ugr.es Oficina: Departamento de Química Orgánica Facultad de Ciencias, Campus de Fuente Nueva, Granada <hr/>