

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

Codi: 44705
Nom: Química orgànica avançada
Cicle: Màster Universitari Oficial
Crèdits ECTS: 4
Curs acadèmic: 2025-26

TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
2226 - Màster Universitari en Química Orgànica	Facultat de Química	1	Anual

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
2226 - Màster Universitari en Química Orgànica	Química orgànica avançada	OBLIGATÒRIA

COORDINACIÓ

GONZALEZ NUÑEZ MARIA ELENA

RESUM

La Química Orgànica Física (2 crèdits) juntament amb la Fotoquímica (2 crèdits) constitueixen la matèria Química Orgànica Avançada. Aquesta matèria 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 tèmics relacionats amb el coneixement teòric de les reaccions pericíclics, incloent les reaccions electrocíclics, 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 s'ha especificat 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 / RESULTATS D' APRENTATGE**2226 - Màster Universitari en Química Orgànica**

Aconseguir un coneixement profund dels aspectes teòrics de les reaccions pericíclicas.

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.

Conèixer els fonaments de les reaccions fotoquímiques, en especial dels compostos orgànics, i les seues aplicacions en síntesi.

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.

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.

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.

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 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 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.

Refermar i aprofundir en aquells temes relacionats amb l'estereoquímica de les molècules orgàniques i la descripció de l'enllaç químic.

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.

Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.

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.

Utilitzar les diferents tècniques d'exposició-oral, escrita, presentacions, panells, etc-per comunicar els seus



coneixements, propostes i posicions.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Estructura i enllaç

Teories de l'enllaç químic. Teoria de l'orbitals moleculars. Conjugació pi. Hiperconjugació. Orbitals moleculars localitzats. Interaccions no covalents. Efectes estereoelectrònics. Conformacions.

2. Teoria de la pertorbació

Reactivitat química: teoria de la pertorbació. Equació de Salem-Klopman. Intermedis reactius. Reaccions iòniques, radicals i pericíclics.

3. Reaccions electrocícliques

Reaccions electrocícliques. Tancaments de cicle conrotatoris i disrotatoris. Diagrames de correlació: regles de selecció. Orbitals frontera. Enfocament de l'estat de transició aromàtic.

4. Cicloadicions

Cicloadicions. Regles de selecció. Reaccions de Diels-Alder: regioselectivitat i estereoselectivitat. Cicloadicions 1,3-dípolars.

5. Reordenaments sigmatròpics

Reordenaments sigmatròpics. Reordenaments sigmatròpics $[1,j]$ de l'hidrogen. Reordenaments sigmatròpics $[1,j]$ de grups alquil. Reordenaments $[3,3]$ de Claisen i Cope. Reordenaments sigmatròpics $[2,3]$. Reaccions Ene.

6. Llum

Estats excitats. Caracterització dels estats excitats. Absorció. Propietats dels estats excitats. Destí dels estats excitats.



7. Reactivitat dels estats excitats

Introducció: transferència d'energia i transferència d'electrons. Aspectes cinètics. Aspectes termodinàmics. Models teòrics. Teoria de Marcus per a reaccions de transferència electrònica.

8. Fonts d'irradiació

Propietats òptiques del material de vidre. Filtres. Altres dispositius d'irradiació: díodes emissors de llum (LEDs). Altres dispositius d'irradiació: díodes emissors de llum orgànics (OLEDs). Comparació de diferents fonts d'irradiació.

9. Fotoquímica i nanotecnologia

Història dels nanomaterials. Propietats úniques dels nanomaterials. Nanopartícules metàl·liques. Nanopartícules semiconductoras: punts quàntics. Nanopartícules semiconductoras: diòxid de titani.

10. Catàlisi organofotoredox

Fonaments de la catàlisi fotoredox. Fotocatalitzadors metàl·lics. Fotocatalitzadors lliures de metalls. Fotocatàlisi per a la formació d'enllaços C-C.

11. Aplicacions ambientals de la fotocatàlisi

Processos d'oxidació avançada (AOPs). Fotocatalitzadors orgànics. Diòxid de titani. Foto-Fenton. Preparació i caracterització de fotocatalitzadors per a aplicacions ambientals.

VOLUM DE TREBALL (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Teoria	20,00
Seminari	20,00
Total hores	40,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	0,00



Estudi i treball autònom	50,00
Preparació de classes	0,00
Preparació d'activitats d'avaluació	10,00
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	60,00

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

s en una publicació científica

AVALUACIÓ

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

1) Examen presencial escrit (70%):

L'examen es realitzarà en el període establert en l'organització del curs i la data concreta s'acordarà entre el professor i els estudiants. En cas de requerir una segona convocatòria, la data s'acordarà igualment entre els estudiants implicats i el professor.

L'examen s'ajustarà a la següent modalitat: examen 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 obliguin l'estudiant a relacionar aspectes diferents que apareguin en diferents temes de l'assignatura o també, si el professor ho considera oportú, en diferents assignatures de la matèria.



2) Avaluació directa del professor (20%):

Un 30% de la nota procedirà de l'avaluació directa del professor en les classes teòriques, de problemes i de tutories, així com qualsevol altra activitat programada a discreció del professor. En aquesta avaluació es tindran en compte aspectes com l'assistència a les classes (**el professor establirà l'obligatorietat o no de l'assistència a les classes**), treball d'estudi i intervencions en les discussions sorgides durant les classes. A discreció del professor es poden plantejar exercicis de seguiment la qualificació dels quals contribuirà a la qualificació final en aquest apartat.

3) Qualificació

La qualificació final serà la mitjana de les notes obtingudes en cadascun dels seus apartats (Fotoquímica i Química Orgànica Física, tenint aquestes dues parts una contribució idèntica en el còmput global). La qualificació mínima d'un apartat per accedir a la mitjana és 4.5. Per superar l'assignatura la qualificació mitjana ha de ser major o igual a 5.

BIBLIOGRAFIA

- 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 volumenes), 3rd Edition, Editado por A. G. Griesbeck, M. Oelgemöller y F. Getti, CRC Press, 2012.
- Glosario de Términos Usados en Fotoquímica. Comisión de Fotoquímica de la IUPAC, 1996. Universitat Autònoma de Barcelona. Servei de Publicacions Bellaterra, 1999.