

Guía Docente				
Datos Identificativos				2015/16
Asignatura (*)	Compostos organometálicos en síntese e catálise		Código	610509011
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial			
Descriptorios				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	1º cuatrimestre	Primeiro	Optativa	3
Idioma	Castelán			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación		Correo electrónico		
Profesorado	Sarandeses Da Costa, Luis Alberto	Correo electrónico	luis.sarandeses@udc.es	
Web				
Descrición xeral	Esta materia, que pertence ao Bloque de Química Sintética, estuda a estrutura e a reactividade dos complexos organometálicos e as súas aplicacións catalíticas en síntese química. Así mesmo, esta materia contén conceptos fundamentais para comprender outras materias do Máster pertencentes aos Bloques de Química Biolóxica e Nanoquímica e Novos Materiais.			

Competencias do título	
Código	Competencias do título
A1	Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química
A2	Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas
A3	Aplicar os materiais e as biomoléculas en ámbitos innovadores da industria e Enxeñaría Química
B1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación
B2	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.
B3	Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos
B7	Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.
B10	Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química
B11	Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe		Competencias do título	
Predicir de forma razoada a estabilidade e a reactividade dos complexos organometálicos en función das súas características electrónicas.	AM1	BM1	
	AM2	BM2	
		BM3	
		BM7	
		BM10	
		BM11	



Propor mecanismos razoables, fundamentados nas reaccións organometálicas básicas, para as reaccións catalizadas por complexos organometálicos.	AM1 AM2 AM3	BM1 BM2 BM3 BM7 BM10 BM11	
Utilizar razoamentos baseados en efectos estéricos e electrónicos para predicir como os cambios nos reactivos, metais e ligandos afectan o curso das reaccións.	AM1	BM1 BM2 BM3	
Plantexar rutas sintéticas actuais con etapas crave baseadas en complexos organometálicos.	AM1 AM2 AM3	BM1 BM2 BM3	
Ler e interpretar críticamente os traballos científicos actuais, con comprensión e explicación do seu contido e relevancia.		BM1 BM7 BM10 BM11	

Contidos	
Temas	Subtemas
Tema 1. Caraterísticas xerais dos complexos organometálicos.	1) Formalismos: a) estado de oxidación, b) configuración electrónica, número de coordinación, e regra dos 18e-, c) clases de ligandos. 2) Consideracións sobre a ligazón. 3) Consideracións estruturais.
Tema 2. Mecanismos das reaccións organometálicas.	1) Mecanismo asociativo e disociativo. 2) Adición oxidante e eliminación reductora. 3) Insercións e eliminacións. 4) Ataques nucleofílicos e electrofílicos a ligandos coordinados ao metal. 5) Transmetalación.
Tema 3. Reaccións de acoplamiento cruzado. Reacción de Heck.	1) Reaccións de acoplamiento cruzado de especies organometálicas Csp3. 2) Reaccións de acoplamiento cruzado de especies organometálicas Csp2. 3) Reaccións de acoplamiento cruzado de especies organometálicas Csp. 4) Reacción de Heck.
Tema 4. Reaccións de carbonilación e descarbonilación.	1) Reactividade xeral de carbonilos metálicos. 2) Reaccións de acoplamiento carbonilante catalizadas por paladio e de carbonilación de alquenos e alquinos. 3) Carbonilacións de interese industrial: proceso Monsanto; hidroformilación (proceso oxo). 4) Reaccións de descarbonilación.
Tema 5. Complexos metal-carbeno	1) Carbenos electrófilos (carbenos de Fischer): preparación e reactividade. 2) Carbenos nucleófilos (carbenos de Schrock). 3) Metátesis de alquenos: mecanismo xeral, ROMP, e RCM.
Tema 6. Complexos metal-alquino.	1) Aspectos estruturais. 2) Complexos metal-alquino estables: complexos de Co como grupos protectores de alquinos e reacción de Nicholas. 3) Reacción de Pauson-Khand. 4) Reaccións de cicloadición de alquinos.
Topic 7. Metal-alkene complexes, metal-diene and dienyl complexes. Reactions via η^3 -allyl complexes. Metal-arene complexes.	1) Metal-alkene complexes of palladium and iron. 2) metal-diene: stabilization of allyl cations and nucleophilic addition. 3) Complexos η^5 -dienyl: synthetic applications. 6) Reactions of allylic substrates catalyzed by Pd, Ni and other metals. 7) Metal-arene complexes of groups 6 and 8 (Cr, Fe, Ru).

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Solución de problemas	A1 A2 A3 B1 B2 B3 B7 B10 B11	9	0	9



Proba mixta	A2 A3 B2 B3 B11	2	0	2
Sesión maxistral	A1 A2 A3 B1 B2 B3 B7 B10 B11	12	52	64
Atención personalizada		1	0	1

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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Solución de problemas	Seminarios realizados con profesorado propio do Máster, ou con profesionais convidados da empresa, a administración ou doutras universidades. Sesións interactivas relacionadas coas distintas materias con debates e intercambio de opinións cos alumnos. Resolución de exercicios prácticos (problemas, cuestións tipo test, interpretación e procesamento da información, avaliación de publicacións científicas, etc.).
Proba mixta	O exame final versará sobre a totalidade dos contidos da materia.
Sesión maxistral	Clases presenciais teóricas. Clases expositivas (utilización do taboleiro, computador, canón), complementadas coas ferramentas propias da docencia virtual.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Solución de problemas	Os alumnos disporán de atención personalizada no horario de tutorías do profesor para a aclaración dos conceptos fundamentais da materia exposta nos grupos grandes, a resolución de cuestións individuais expostas nos seminarios e nas sesións maxistrais. Ademais, o alumno poderá recibir atención personalizada sobre calquera aspecto da materia durante o horario de tutorías do profesor.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Solución de problemas	A1 A2 A3 B1 B2 B3 B7 B10 B11	A avaliación continua terá un peso do 40% na cualificación da materia e constará de dous compoñentes: clases interactivas de grupo reducido (seminarios) e clases interactivas de grupo moi reducido (tutorías). Os seminarios e as tutorías incluírán os seguintes elementos resolución de problemas e casos prácticos (15%), realización de traballos e informes escritos (5%), exposición oral [(casos prácticos, problemas), 10%] e cuestións orais durante o curso (10%).	40
Proba mixta	A2 A3 B2 B3 B11	O exame final versará sobre a totalidade dos contidos da materia.	60

Observacións avaliación

Fontes de información	
Bibliografía básica	- Hegedus, L. S.; Söderberg, B. C. G. (2009). Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules 3rd Ed.. University Science Books - Bates, R. (2012). Organic Synthesis using Transition Metals. Wiley - Beller, M.; Bolm, C., Eds. (2004). Transition Metals for Organic Synthesis: Building Blocks and Fine Chemicals, 2nd Ed.. Wiley-VCH - De Meijere, A.; Diederich, F., Eds. (2004). Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions, 2nd Ed.. Wiley-VCH - Crabtree, R. H.; Peris Fajarnés, E., Eds. (1997). Química organometálica de los metales de transición. Publicacions de la Universitat Jaume I



Bibliografía complementaria	
-----------------------------	--

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Profundización en Química Orgánica/610509004

Profundización en Química Inorgánica/610509003

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Análise Estrutural Avanzado/610509005

Mecanismos de reacción e catálise/610509009

Síntese estereoselectiva/610509012

Materias que continúan o temario

Observacións

(*)A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente de acordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías