



Guía Docente

| Datos Identificativos | | | | | 2017/18 |
|-----------------------|---|----------|--------------------|---|---------|
| Asignatura (*) | Aplicacións Sintéticas dos Compostos Organometálicos | | Código | 610509112 | |
| Titulación | Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017) | | | | |
| Descritores | | | | | |
| Ciclo | Período | Curso | Tipo | Créditos | |
| Mestrado Oficial | Anual | Primeiro | Optativa | 3 | |
| Idioma | Castelán | | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | | |
| Prerrequisitos | | | | | |
| Departamento | Química | | | | |
| Coordinación | Sarandeses Da Costa, Luis Alberto | | Correo electrónico | luis.sarandeses@udc.es | |
| Profesorado | Perez Sestelo, Jose Sarandeses Da Costa, Luis Alberto | | Correo electrónico | jose.perez.sestelo@udc.es luis.sarandeses@udc.es | |
| Web | | | | | |
| Descrición xeral | <p>Esta materia é básica na especialidade Química Sintética porque estuda a reactividade dos compostos organometálicos e as súas aplicacións en síntese e catálise. Así mesmo, os conceptos abordados nesta materia son de utilidade noutras de módulos veciños como Estrutura e Reactividade Química, Nanoquímica e Novos Materiais e Química Biolóxica.</p> <p>Esta materia está integrada na especialidade Química Sintética. Relaciónase coas materias Compostos Organometálicos e Química de Coordinación Avanzada, que recollen aspectos xerais da estrutura e reactividade dos compostos organometálicos e dos complexos metálicos de coordinación.</p> <p>A utilización dos compostos organometálicos e a catálise por metais de transición son ferramentas fundamentais da química sintética actual, tanto no seu aspecto académico como no industrial. A síntese orgánica actual expón o desenvolvemento de procesos máis selectivos e sustentables, obxectivos para os que se requiren con frecuencia os compostos organometálicos e a catálise.</p> | | | | |

Competencias / Resultados do título

| Código | Competencias / Resultados do título |
|--------|--|
| A1 | CE1 - Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química |
| A2 | CE2 - Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas |
| A3 | CE4 - Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química. |
| A6 | CE6 - Diseñar procesos que impliquen o tratamento ou eliminación de produtos químicos perigosos |
| A8 | CE8 - Analizar e utilizar os datos obtidos de forma independente en experimentos de laboratorio complexos relacionándoos coas técnicas químicas, físicas ou biolóxicas axeitadas, incluíndo o uso de fontes bibliográficas primarias |
| B1 | CB6 ? 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 | CB7 - 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. |
| B4 | CB9 - Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades. |
| B5 | CB10 - Que os estudantes posúan as habilidades de aprendizaxe que lles permitan continuar estudando dun modo que haberá de ser en gran medida autodirixido ou autónomo. |
| B7 | CG2 - Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación. |
| B10 | CG5 - Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química |
| B11 | CG6 - Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional |

Resultados da aprendizaxe



| Resultados de aprendizaxe | Competencias / Resultados do título | | |
|---|-------------------------------------|--|--|
| Comprender o fundamento dos ciclos catalíticos desde o punto de vista das coordenadas de reacción e as superficies de enerxía potencial.. | AM1 AM6 AM8 | BM5 | |
| Entender as aplicacións en sínteses da diversidade de procesos de formación de ligazóns mediadas por compostos organometálicos. | AM2 AM3 AM6 | BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11 | |
| Propor secuencias sintéticas con desconexións clave baseadas en procesos sintéticos de compostos organometálicos | AM2 AM3 AM6 | BM1 BM2 BM4 BM7 BM11 | |

| Contidos | |
|--|--|
| Temas | Subtemas |
| Tema 1. Principios e fundamentos enerxéticos dos ciclos catalíticos organometálicos. | ? Conceptos xerais. ? Termodinámica e cinética dos ciclos catalíticos de reaccións catalizadas por metais de transición. ? Aplicación: Acoplamiento cruzado catalizado por Pd; Sinerxía entre resultados computacionais e experimentais. |
| Tema 2. Reaccións de acoplamiento cruzado e reacción de Heck. | ? Reaccións de acoplamiento cruzado. Xeneralidades. Grupos saíntes. Metais. Selectividade. ? Reaccións de formación de enlaces carbono-carbono: organometálicos de Li, Zn, Al, Zr, Sn, Cu; compostos de B e Se; outros metais; enolatos. ? Reaccións de formación de enlaces carbono-heteroátomo. ? Reacción de Heck. Compoñentes da reacción. Reaccións inter- e intramoleculares. Reaccións de Heck asimétricas. Reaccións de Heck con especies organometálicas. |
| Tema 3. Reaccións de inserción. | ? Reaccións de carbonilación. Xeneralidades. Mecanismo. ? Reaccións de acoplamiento carbonilante. ? Reaccións de hidroformilación. ? Reaccións de carbonilación con complexos de carbonilo. ? Carboxilación. ? Reaccións de descarbonilación e acoplamiento descarbonilante. ? Outras reaccións de inserción con circonio e titanio. |
| Tema 4. Reaccións de complexos η^3 -alilo. | ? Complexos η^3 -alilo de Paladio (1. Síntese e propiedades. 2. Rexioselectividade e estereoselectividade) ? Reaccións de substitución alílica catalizadas por complexos de Paladio (1. Alquilación alílica. 2. Aminación, eterificación e redución alílica. 3. Reaccións de ciclación a través de procesos de inserción en alquenos. 4. Reaccións de cicloadición a través de intermedios trimetilenometano). ? Reaccións de substitución alílica catalizadas por complexos doutros metais de transición (Iridio, Níquel, Ferro, Molibdeno). ? Reaccións de alilación con alquinos e alenos catalizadas por complexos de Rodio. |



| | |
|---|--|
| Tema 5. Reaccións de complexos electrófilos de alquenos, alquinos, dienos e arenos. | <ul style="list-style-type: none"> ? Reaccións de inserción en alquinos e reaccións tándem tipo Heck, Suzuki, etc.. ? Reaccións de inserción mediadas por outros metais (Zr e Ti). ? Adicións electrófilas sobre alquenos e alquinos. ? Reacción de Nicholas e Pauson-Khand. ? Reaccións de alquenos con paladio en alto estado de oxidación. ? Aplicacións sintéticas de complexos n4-dienilo e n6-areno. |
| Tema 6. Reactividade de carbenos metálicos. | <ul style="list-style-type: none"> ? Características dos carbenos. ? Carbenos de metais de transición. Estrutura e tipos. ? Transformacións que involucran carbenos de metais de transición. ? Metátesis de olefinas. |
| Tema 7. Reaccións de activación de enlaces C?H. | <ul style="list-style-type: none"> ? Introducción á activación de enlaces C-H: relevancia, dificultades e principais mecanismos de activación. ? Reaccións de inserción de carbenos e nitrenos. ? Reacción de borilación catalizada por Ir. ? Funcionalización de alcanos e arenos catalizada por Pd(*II): osixenación, arilación, halogenación, reacción de Heck oxidante. |

| Planificación | | | | |
|------------------------|--|---|-------------------------|--------------|
| Metodoloxías / probas | Competencias / Resultados | Horas lectivas (presenciais e virtuais) | Horas traballo autónomo | Horas totais |
| Seminario | A1 A2 A3 A6 A8 B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11 | 7 | 18 | 25 |
| Proba mixta | A1 A2 A3 B5 B2 | 3 | 0 | 3 |
| Sesión maxistral | A1 A8 B1 B2 B7 B10 B11 | 12 | 33 | 45 |
| Atención personalizada | | 2 | 0 | 2 |

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

| Metodoloxías | |
|------------------|---|
| Metodoloxías | Descrición |
| Seminario | <p>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.</p> <p>Resolución de exercicios prácticos (problemas, cuestións tipo test, interpretación e procesamento da información, avaliación de publicacións científicas, etc.)</p> <p>Así mesmo, durante os seminarios contéplase a posibilidade de levar a cabo outras metodoloxías:</p> <ul style="list-style-type: none"> ? Realización de traballos, tanto individualmente, como en grupo, sobre temas científicos relacionados coas distintas materias do Máster. ? Exposición oral de traballos, informes, etc., incluíndo debate con profesores e alumnos. ? Utilización de programas informáticos especializados e internet. Soporte docente *on-*line (Campus Virtual). |
| Proba mixta | <p>Prográmase 1 exame escrito final, que permitirá avaliar obxectivamente o grao de asimilación e a capacidade de aplicación dos contidos da materia por parte do alumno. A proba obxectiva incluírá un único tipo de preguntas, que estarán relacionadas coa estrutura, a reactividade e a síntese de compostos orgánicos, e que permitirán determinar se as respostas son correctas.</p> |
| Sesión maxistral | <p>Clases presenciais teóricas. Clases expositivas (utilización da pizarra, computador, canón), complementadas coas ferramentas propias da docencia virtual.</p> |

| Atención personalizada | |
|------------------------|------------|
| Metodoloxías | Descrición |
| | |



| | |
|-------------------------------|---|
| Seminario Sesión maxistral | Prográmanse 2 tutorías individuais ou en grupo reducido para comprobar a comprensión da materia e complementar a formación do alumno mediante resolución de dúbidas e outras cuestións. |
|-------------------------------|---|

| Avaliación | | | |
|--------------|--|---|---------------|
| Metodoloxías | Competencias / Resultados | Descrición | Cualificación |
| Seminario | A1 A2 A3 A6 A8 B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11 | A avaliación continua terá un peso do 40% na cualificación da materia e constará os seguintes compoñentes: resolución de problemas e casos prácticos (15%), exposición oral [(casos prácticos, problemas), 10%] e cuestións orais durante o curso (10%) e asistencia e participación (10%). | 40 |
| Proba mixta | A1 A2 A3 B5 B2 | O exame final versará sobre a totalidade dos contidos da materia. | 60 |

| Observacións avaliación |
|---|
| <p>A avaliación desta materia farase mediante avaliación continua e a realización dun exame final.</p> <p>Os alumnos repetidores terán o mesmo réxime de asistencia ás clases que os que cursan a materia por primeira vez.</p> <p>A avaliación continua (N1) terá un peso do 40% na cualificación da materia e constará os seguintes compoñentes: resolución de problemas e casos prácticos (15%), exposición oral [(casos prácticos, problemas), 10%] e cuestións orais durante o curso (10%) e asistencia e participación (10%).</p> <p>O exame final (N2) versará sobre a totalidade dos contidos da materia.</p> <p>A cualificación do alumno obterase como resultado de aplicar a fórmula seguinte: Nota final = máximo (0.4 x N1 + 0.6 x N2)</p> <p>Sendo N1 a nota numérica correspondente á avaliación continua (escala 0?10) e N2 a nota numérica do exame final (escala 0?10).</p> |

| Fontes de información | |
|------------------------------------|---|
| Bibliografía básica | <ul style="list-style-type: none">- Bates, R. (2012). Organic Synthesis Using Transition Metals, 2nd Ed.. Wiley- Hegedus, L. S. (1999). Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules, 2nd Ed.. University Science Books |
| Bibliografía complementaria | <ul style="list-style-type: none">- Luther, G. W. (2016). Reactivity of Transition Metal Complexes: Thermodynamics, Kinetics and Catalysis, in Inorganic Chemistry for Geochemistry and Environmental Sciences: Fundamentals and Applications. Wiley- Cybulski, A.; Moulijn, J. A.; Stankiewicz, A. (2010). Novel Concepts in Catalysis and Chemical Reactors: Improving the Efficiency for the Future. Wiley-VCH- Ananikov, V. P. (2015). Understanding Organometallic Reaction Mechanisms and Catalysis: Computational and Experimental Tools. Wiley-VCH- Negishi, E., Ed. (2002). Handbook of Organopalladium Chemistry for Organic Synthesis. Wiley- De Meijere, A., Bräse, S., Oestreich, M. (2014). Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions and More. Wiley-VCH- Beller, M., Bolm, C. (2004). Transition Metals for Organic Synthesis, 2nd Ed.. Wiley-VCH- Kazmaier, U. (2012). Transition Metal Catalyzed Enantioselective Allylic Substitution in Organic Synthesis. Springer-Verlag- Crabtree, R. H. (2005). The Organometallic Chemistry of the Transition Metals, 4th Ed.. Wiley- Yu, J.-Q. (2016). Science of Synthesis: Catalytic Transformations via C-H Activation Vol. 1 & 2. Thieme |

| Recomendacións |
|--|
| Materias que se recomenda ter cursado previamente |
| Procesos Industriais e Sustentabilidade/610509104 |
| Química Organometálica/610509111 |
| Determinación Estructural Avanzada/610509103 |
| Estrutura e Reactividade dos Compostos Orgánicos/610509114 |
| Materias que se recomenda cursar simultaneamente |
| Síntese estereoselectiva/610509113 |



| |
|----------------------------------|
| 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 dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías