



## 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		Correo electrónico	jose.perez.sestelo@udc.es	
	Sarandeses Da Costa, Luis Alberto			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 $\eta^3$ -alilo.	? Complexos $\eta^3$ -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"> <li>? Reaccións de inserción en alquinos e reaccións tándem tipo Heck, Suzuki, etc..</li> <li>? Reaccións de inserción mediadas por outros metais (Zr e Ti).</li> <li>? Adicións electrófilas sobre alquenos e alquinos.</li> <li>? Reacción de Nicholas e Pauson-Khand.</li> <li>? Reaccións de alquenos con paladio en alto estado de oxidación.</li> <li>? Aplicacións sintéticas de complexos n4-dienilo e n6-areno.</li> </ul>
Tema 6. Reactividade de carbenos metálicos.	<ul style="list-style-type: none"> <li>? Características dos carbenos.</li> <li>? Carbenos de metais de transición. Estrutura e tipos.</li> <li>? Transformacións que involucran carbenos de metais de transición.</li> <li>? Metátesis de olefinas.</li> </ul>
Tema 7. Reaccións de activación de enlaces C?H.	<ul style="list-style-type: none"> <li>? Introducción á activación de enlaces C-H: relevancia, dificultades e principais mecanismos de activación.</li> <li>? Reaccións de inserción de carbenos e nitrenos.</li> <li>? Reacción de borilación catalizada por Ir.</li> <li>? Funcionalización de alcanos e arenos catalizada por Pd(*II): osixenación, arilación, halogenación, reacción de Heck oxidante.</li> </ul>

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"> <li>? Realización de traballos, tanto individualmente, como en grupo, sobre temas científicos relacionados coas distintas materias do Máster.</li> <li>? Exposición oral de traballos, informes, etc., incluíndo debate con profesores e alumnos.</li> <li>? Utilización de programas informáticos especializados e internet. Soporte docente *on-*line (Campus Virtual).</li> </ul>
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	
<b>Bibliografía básica</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Bates, R. (2012). Organic Synthesis Using Transition Metals, 2nd Ed.. Wiley</li><li>- Hegedus, L. S. (1999). Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules, 2nd Ed.. University Science Books</li></ul>
<b>Bibliografía complementaria</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- 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</li><li>- Cybulski, A.; Moulijn, J. A.; Stankiewicz, A. (2010). Novel Concepts in Catalysis and Chemical Reactors: Improving the Efficiency for the Future. Wiley-VCH</li><li>- Ananikov, V. P. (2015). Understanding Organometallic Reaction Mechanisms and Catalysis: Computational and Experimental Tools. Wiley-VCH</li><li>- Negishi, E., Ed. (2002). Handbook of Organopalladium Chemistry for Organic Synthesis. Wiley</li><li>- De Meijere, A., Bräse, S., Oestreich, M. (2014). Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions and More. Wiley-VCH</li><li>- Beller, M., Bolm, C. (2004). Transition Metals for Organic Synthesis, 2nd Ed.. Wiley-VCH</li><li>- Kazmaier, U. (2012). Transition Metal Catalyzed Enantioselective Allylic Substitution in Organic Synthesis. Springer-Verlag</li><li>- Crabtree, R. H. (2005). The Organometallic Chemistry of the Transition Metals, 4th Ed.. Wiley</li><li>- Yu, J.-Q. (2016). Science of Synthesis: Catalytic Transformations via C-H Activation Vol. 1 &amp; 2. Thieme</li></ul>

Recomendacións
<b>Materias que se recomenda ter cursado previamente</b>
Procesos Industriais e Sustentabilidade/610509104
Química Organometálica/610509111
Determinación Estrutural Avanzada/610509103
Estrutura e Reactividade dos Compostos Orgánicos/610509114
<b>Materias que se recomenda cursar simultaneamente</b>
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