



| Guía Docente          |  |          |                    |                           |
|-----------------------|--|----------|--------------------|---------------------------|
| Datos Identificativos |  |          |                    | 2020/21                   |
| Asignatura (*)        | Aplicacións Sintéticas dos Compostos Organometálicos   |          | Código             | 610509112                 |
| Titulación            |  |          |                    |                           |
| Descritores           |  |          |                    |                           |
| Ciclo                 | Período  | Curso    | Tipo               | Créditos                  |
| Mestrado Oficial      | 2º cuatrimestre  | 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                   | <a href="http://www.usc.es/gl/centros/quimica/curso/master.html">www.usc.es/gl/centros/quimica/curso/master.html</a>   |          |                    |                           |
| 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 expone o desenvolvemento de procesos máis selectivos e sustentables, obxectivos para os que se requiren con frecuencia os compostos organometálicos e a catálise.</p> |          |                    |                           |



|                             |  |
|-----------------------------|--|
| <b>Plan de continxencia</b> | <p>1. Modificacións nos contidos<br/>? Non se realizarán cambios.</p> <p>2. Metodoloxías<br/>*Metodoloxías docentes que se manteñen<br/>? Sesión maxistral.<br/>? Seminario.<br/>? Proba mixta.</p> <p>*Metodoloxías docentes que se modifican<br/>? Todas as metodoloxías docentes se levan a cabo mediante Teams.</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado<br/>? Correo electrónico: permanente.<br/>? Moodle: Diariamente. Segundo a necesidade do alumando.<br/>? Teams: Sesións maxistrais, seminarios, titorías (2-6 h/semán).</p> <p>4. Modificacións na avaliación<br/>? Seminario: 60%<br/>A avaliación continua terá un peso do 60% na cualificación da materia e constará os seguintes compoñentes: resolución de problemas e casos prácticos, cuestións durante o curso e asistencia e participación. Pasa de 40% a 60%.<br/><br/>? Proba mixta 40%<br/>Proba mixta que versará sobre os contidos explicados. Común ao resto das universidades participantes no mestrado. Pasa de 60% a 40%.<br/><br/>*Observacións de avaliación:<br/>A proba mixta consistirá nun conxunto de preguntas través de Moodle ou Forms para responder nun tempo determinado. Non hai restricións de mínimos nos apartados avaliados.<br/>Se o alumnado tivera dificultades para a realización da proba mixta fariase uso de chamadas telefónicas ou se empregaría un método de avaliación asíncrono.<br/>Alumnado con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia: elaboración de traballos tutelados (60%) e proba mixta (40%).</p> <p>5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía<br/>Non hai modificacións da bibliografía.</p> |
|-----------------------------|--|

| Competencias / Resultados do título |                                     |
|-------------------------------------|-------------------------------------|
| Código                              | Competencias / Resultados do título |

| 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 | BM5                                 |  |
|   | AM6 |                                     |  |
|   | AM8 |                                     |  |



|   |                   |  |
|---|-------------------|--|
| Entender as aplicacións en sínteses da diversidade de procesos de formación de ligazóns mediadas por compostos organometálicos. | AM2<br>AM3<br>AM6 | BM1<br>BM2<br>BM4<br>BM7<br>BM10<br>BM11 |
| Propor secuencias sintéticas con desconexións clave baseadas en procesos sintéticos de compostos organometálicos                | AM2<br>AM3<br>AM6 | BM1<br>BM2<br>BM4<br>BM7<br>BM11         |

| Contidos   |  |
|--|--|
| Temas  | Subtemas   |
| Tema 1. Principios e fundamentos enerxéticos dos ciclos catalíticos organometálicos. | ? Conceptos xerais.<br>? Termodinámica e cinética dos ciclos catalíticos de reaccións catalizadas por metais de transición.<br>? 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.<br>? Reaccións de formación de enlaces carbono-carbono: organometálicos de Li, Zn, Al, Zr, Sn, Cu; compostos de B e Se; outros metais; enolatos.<br>? Reaccións de formación de enlaces carbono-heteroátomo.<br>? 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.<br>? Reaccións de acoplamiento carbonilante.<br>? Reaccións de hidroformilación.<br>? Reaccións de carbonilación con complexos de carbonilo.<br>? Carboxilación.<br>? Reaccións de descarbonilación e acoplamiento descarbonilante.<br>? Outras reaccións de inserción con circonio e titanio.   |
| Tema 4. Reaccións de complexos n <sup>3</sup> -alilo.                                | ? Complexos n <sup>3</sup> -alilo de Paladio (1. Síntese e propiedades. 2. Rexioselectividade e estereoselectividade)<br>? 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).<br>? Reaccións de substitución alílica catalizadas por complexos doutros metais de transición (Iridio, Níquel, Ferro, Molibdeno).<br>? Reaccións de alilación con alquinos e alenos catalizadas por complexos de Rodio. |
| Tema 5. Reaccións de complexos electrófilos de alquenos, alquinos, dienos e arenos.  | ? Reaccións de inserción en alquinos e reaccións tándem tipo Heck, Suzuki, etc..<br>? Reaccións de inserción mediadas por outros metais (Zr e Ti).<br>? Adicións electrófilas sobre alquenos e alquinos.<br>? Reacción de Nicholas e Pauson-Khand.<br>? Reaccións de alquenos con paladio en alto estado de oxidación.<br>? Aplicacións sintéticas de complexos n <sup>4</sup> -dienilo e n <sup>6</sup> -areno.   |



|   |   |
|---|---|
| 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<br>B2 B4 B5 B7 B10 B11 | 7                                       | 18                      | 25           |
| Proba mixta            | A1 A2 A3 B2 B5                           | 3                                       | 0                       | 3            |
| Sesión maxistral       | A1 A8 B1 B2 B7 B10<br>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<br>Sesión maxistral | <p>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.</p> |

| Avaliación |
|------------|
|------------|



| Metodoloxías | Competencias / Resultados                | Descrición  | Cualificación |
|--------------|--|---|---------------|
| Seminario    | A1 A2 A3 A6 A8 B1<br>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 B2 B5                           | O exame final versará sobre a totalidade dos contidos da materia.   | 60            |

### Observacións avaliación

A avaliación desta materia farase mediante avaliación continua e a realización dun exame final.

Os alumnos repetidores terán o mesmo réxime de asistencia ás clases que os que cursan a materia por primeira vez.

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%).

O exame final (N2) versará sobre a totalidade dos contidos da materia.

A cualificación do alumno obterase como resultado de aplicar a fórmula seguinte:

Nota final = máximo (0.4 x N1 + 0.6 x N2)

Sendo N1 a nota numérica correspondente á avaliación continua (escala 0?10) e N2 a nota numérica do exame final (escala 0?10).

### 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

#### 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 (en extinción)/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