



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|--|----------|--------------------|---------------------------|
| Datos Identificativos | | | | 2021/22 |
| Asignatura (*) | Aplicacións Sintéticas dos Compostos Organometálicos | | Código | 610509112 |
| Titulación | Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020) | | | |
| Descriptorios | | | | |
| 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 | www.usc.es/gl/centros/quimica/curso/master.html | | | |
| 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> | | | |



| | |
|-----------------------------|--|
| Plan de continxencia | <p>1. Modificacións nos contidos ? Non se realizarán cambios.</p> <p>2. Metodoloxías *Metodoloxías docentes que se manteñen ? Sesión maxistral. ? Seminario. ? Proba mixta.</p> <p>*Metodoloxías docentes que se modifican ? Todas as metodoloxías docentes se levan a cabo mediante Teams.</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado ? Correo electrónico: permanente. ? Moodle: Diariamente. Segundo a necesidade do alumando. ? Teams: Sesións maxistrais, seminarios, titorías (2-6 h/semán).</p> <p>4. Modificacións na avaliación ? Seminario: 60% 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%. ? Proba mixta 40% Proba mixta que versará sobre os contidos explicados. Común ao resto das universidades participantes no mestrado. Pasa de 60% a 40%. *Observacións de avaliación: 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. Se o alumnado tivera dificultades para a realización da proba mixta fariase uso de chamadas telefónicas ou se empregaría un método de avaliación asíncrono. 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 Non hai modificacións da bibliografía.</p> |
|-----------------------------|--|

| Competencias do título | |
|------------------------|--|
| Código | Competencias 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 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. | <ul style="list-style-type: none"> ? 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 n ³ -alilo. | <ul style="list-style-type: none"> ? Complexos n³-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 | Horas presenciais | Horas non presenciais / 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 B2 B5 | 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. Sesiões 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> <p>? Realización de traballos, tanto individualmente, como en grupo, sobre temas científicos relacionados coas distintas materias do Máster.</p> <p>? Exposición oral de traballos, informes, etc., incluíndo debate con profesores e alumnos.</p> <p>? Utilización de programas informáticos especializados e internet. Soporte docente *on-*line (Campus Virtual).</p> |
| 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 | <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 | 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 B2 B5 | 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:</p> <p>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 | <p>- Bates, R. (2012). Organic Synthesis Using Transition Metals, 2nd Ed.. Wiley</p> <p>- Hegedus, L. S. (1999). Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules, 2nd Ed.. University Science Books</p> |
|----------------------------|---|



| | |
|------------------------------------|---|
| 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 (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