



Guía Docente				
Datos Identificativos			2019/20	
Asignatura (*)	Aplicacións Sintéticas dos Compostos Organometálicos		Código	610509112
Titulación				
Descriptor				
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	www.usc.es/gl/centros/quimica/curso/master.html			
Descrición xeral	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. 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. 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.			

Competencias do título	
Código	Competencias do título

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	BM5	
	AM6		
	AM8		
Entender as aplicacións en sínteses da diversidade de procesos de formación de ligazóns mediadas por compostos organometálicos.	AM2	BM1	
	AM3	BM2	
	AM6	BM4	
		BM7	
		BM10	
Propor secuencias sintéticas con desconexións clave baseadas en procesos sintéticos de compostos organometálicos		BM11	
	AM2	BM1	
	AM3	BM2	
	AM6	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 descarboxilación e acoplamiento descarboxilante. ? 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.	? Reaccións de inserción en alquinos e reaccións tandem 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 η^4-dienilo e η^6-areno.
Tema 6. Reactividade de carbenos metálicos.	? 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.	? 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	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.) Así mesmo, durante os seminarios contéplase a posibilidade de levar a cabo outras metodoloxías: ? 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	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.
Sesión maxistral	Clases presenciais teóricas. Clases expositivas (utilización da pizarra, computador, canón), complementadas coas ferramentas propias da docencia virtual.

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	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



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:

$$\text{Nota final} = \text{máximo} (0.4 \times N1 + 0.6 \times N2)$$

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

Bibliografía básica	- 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	- 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 Estrutural 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