UNIVERSIDADE DA CORUÑA

Guia docente					
Datos Identificativos					2015/16
Asignatura (*)	Compuestos organometálicos en síntesis y catálisis			Código	610509011
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial				
Descriptores					
Ciclo	Periodo	Curso		Tipo	Créditos
Máster Oficial	1º cuatrimestre	Primero		Optativa	3
Idioma	Castellano				
Modalidad docente	Presencial				
Prerrequisitos					
Departamento	Química Fundamental				
Coordinador/a			Correo electrónico		
Profesorado	Sarandeses Da Costa, Luis Alberto		Correo electrónico	luis.sarandeses@udc.es	
Web					
Descripción general	Esta asignatura, que pertenece al Bloque de Química Sintética, estudia la estructura y la reactividad de los complejos organometálicos y sus aplicaciones catalíticas en síntesis química. Asimismo, esta materia contiene conceptos fundamentales para comprender otras asignaturas del Máster pertenecientes a los Bloques de Química Biológica y Nanoquímica y Nuevos Materiales.				

Competencias / Resultados del título	
Código	Competencias / Resultados del título
A1	Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A3	Aplicar los materiales y las biomoléculas en campos innovadores de la industria e ingeniería química
B1	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
B2	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B3	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
B7	Identificar información de la bibliografía utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
B10	Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje	Competencias / Resultados del título		
Predecir de forma razonada la estabilidad y la reactividad de los complejos organometálicos en función de sus características electrónicas.	AM1 AM2	BM1 BM2 BM3 BM7 BM10 BM11	

Proponer mecanismos razonables, fundamentados en las reacciones organometálicas básicas, para las reacciones catalizadas por complejos organometálicos.	AM1 AM2 AM3	BM1 BM2 BM3 BM7 BM10 BM11	
Utilizar razonamientos basados en efectos estéricos y electrónicos para predecir cómo los cambios en los reactivos, metales y ligandos afectan al curso de las reacciones.	AM1	BM1 BM2 BM3	
Plantear rutas sintéticas actuales con etapas clave basadas en complejos organometálicos.	AM1 AM2 AM3	BM1 BM2 BM3	
Leer e interpretar críticamente los trabajos científicos actuales, con comprensión y explicación de su contenido y significancia.		BM1 BM7 BM10 BM11	

Contenidos	
Tema	**Subtema**
Tema 1. Caraterísticas generales de los complejos organometálicos.	1) Formalismos: a) estado de oxidación, b) configuración electrónica, número de coordinación, y regla de los 18e-, c) clases de ligandos. 2) Consideraciones sobre el enlace. 3) Consideraciones estructurales.
Tema 2. Mecanismos de las reacciones organometálicas.	1) Mecanismo asociativo y disociativo. 2) Adición oxidante y eliminación reductora. 3) Inserciones y eliminaciones. 4) Ataques nucleofílicos y electrofílicos a ligandos coordinados al metal. 5) Transmetalación.
Tema 3. Reacciones de acoplamiento cruzado. Reacción de Heck.	1) Reacciones de acoplamiento cruzado de especies organometálicas Csp3. 2) Reacciones de acoplamiento cruzado de especies organometálicas Csp2. 3) Reacciones de acoplamiento cruzado de especies organometálicas C-sp. 4) Reacción de Heck.
Tema 4. Reacciones de carbonilación y descarbonilación.	1) Reactividad general de carbonilos metálicos. 2) Reacciones de acoplamiento carbonilante catalizadas por paladio y de carbonilación de alquenos y alquinos. 3) Carbonilaciones de interés industrial: proceso Monsanto; hidroformilación (proceso oxo). 4) Reacciones de descarbonilación.
Tema 5. Complejos metal-carbeno.	1) Carbenos electrófilos (carbenos de Fischer): preparación y reactividad. 2) Carbenos nucleófilos (carbenos de Schrock). 3) Metátesis de alquenos: mecanismo general, ROMP, y RCM.
Tema 6. Complejos metal-alquino.	1) Aspectos estructurales. 2) Complejos metal-alquino estables: complejos de Co como grupos protectores de alquinos y reacción de Nicholas. 3) Reacción de Pauson-Khand. 4) Reacciones de cicloadición de alquinos.
Tema 7. Complejos metal-alqueno, metal-dieno y dienilo. Reacciones vía complejos n3-alilo. Complejos metal-areno.	1) Complejos metal-alqueno de paladio y de hierro. 2) Complejos metal-dieno: estabilización de cationes alílicos y adición de nucleófilos. 3) Complexos ?5-dienilo: aplicaciones sintéticas. 6) Reacciones de sustratos alílicos catalizadas por Pd, Ni y otros metales. 7) Complejos metal-areno de los grupos 6 y 8 (Cr, Fe, Ru).

Planificación				
Metodologías / pruebas	**Competencias / Resultados**	**Horas lectivas (presenciales y virtuales)**	**Horas trabajo autónomo**	**Horas totales**
Solución de problemas	A1 A2 A3 B1 B2 B3 B7 B10 B11	9	0	9

Prueba mixta	A2 A3 B2 B3 B11	2	0	2
Sesión magistral	A1 A2 A3 B1 B2 B3 B7 B10 B11	12	52	64
Atención personalizada		1	0	1
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	**Descripción**
Solución de problemas	Seminarios realizados con profesorado propio del Máster, o con profesionales invitados de la empresa, la administración o de otras universidades. Sesiones interactivas relacionadas con las distintas materias con debates e intercambio de opiniones con los alumnos. Resolución de ejercicios prácticos (problemas, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.).
Prueba mixta	El examen final versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.
Sesión magistral	Clases presenciales teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, ordenador, cañón), complementadas con las herramientas propias de la docencia virtual.

Atención personalizada	
Metodologías	**Descripción**
Solución de problemas	Los alumnos dispondrán de atención personalizada en el horario de tutorías del profesor para la aclaración de los conceptos fundamentales de la materia expuesta en los grupos grandes, la resolución de cuestiones individuales planteadas en los seminarios y en las sesiones magistrales. Además, el alumno podrá recibir atención personalizada sobre cualquier aspecto de la materia durante el horario de tutorías del profesor.

Evaluación			
Metodologías	**Competencias / Resultados**	**Descripción**	**Calificación**
Solución de problemas	A1 A2 A3 B1 B2 B3 B7 B10 B11	La evaluación continua tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: clases interactivas de grupo reducido (seminarios) y clases interactivas de grupo muy reducido (tutorías). Los seminarios y las tutorías incluirán los siguientes elementos resolución de problemas y casos prácticos (15%), realización de trabajos e informes escritos (5%), exposición oral [(casos prácticos, problemas), 10%] y cuestiones orales durante el curso (10%).	40
Prueba mixta	A2 A3 B2 B3 B11	El examen final versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.	60

Observaciones evaluación

Fuentes de información

Básica	- Hegedus, L. S.; Söderberg, B. C. G. (2009). Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules 3rd Ed.. University Science Books - Bates, R. (2012). Organic Synthesis using Transition Metals. Wiley - Beller, M.; Bolm, C., Eds. (2004). Transition Metals for Organic Synthesis: Building Blocks and Fine Chemicals, 2nd Ed.. Wiley-VCH - De Meijere, A.; Diederich, F., Eds. (2004). Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions, 2nd Ed.. Wiley-VCH - Crabtree, R. H.; Peris Fajarnés, E., Eds. (1997). Química organometálica de los metales de transición. Publicacions de la Universitat Jaume I
Complementária	

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Profundización en Química Orgánica/610509004 Profundización en Química Inorgánica/610509003
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Análisis Estructural Avanzado/610509005 Mecanismos de reacción y catálisis/610509009 Síntesis estereoselectiva/610509012
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías