



## Guía Docente

| Guía Docente          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          |                    |                           |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|--------------------|---------------------------|
| Datos Identificativos |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |          |                    | 2019/20                   |
| Asignatura (*)        | Aplicacións Sintéticas dos Compostos Organometálicos                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |          | Código             | 610509112                 |
| Titulación            | Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |          |                    |                           |
| 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      | <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 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<br>AM6<br>AM8      | BM5                                      |  |
| 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 cruce 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. | <p>? Conceptos xerais.</p> <p>? Termodinámica e cinética dos ciclos catalíticos de reaccións catalizadas por metais de transición.</p> <p>? Aplicación: Acoplamiento cruzado catalizado por Pd; Sinergia entre resultados computacionais e experimentais.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| Tema 2. Reaccións de acoplamiento cruzado e reacción de Heck.                        | <p>? Reaccións de acoplamiento cruzado. Xeneralidades. Grupos saíntes. Metais. Selectividade.</p> <p>? Reaccións de formación de enlaces carbono-carbono: organometálicos de Li, Zn, Al, Zr, Sn, Cu; compostos de B e Se; outros metais; enolatos.</p> <p>? Reaccións de formación de enlaces carbono-heteroátomo.</p> <p>? Reacción de *Heck. Componentes da reacción. Reaccións inter- e intramoleculares. Reaccións de Heck asimétricas. Reaccións de Heck con especies organometálicas.</p>                                                                                                                                                                             |
| Tema 3. Reaccións de inserción.                                                      | <p>? Reaccións de carbonilación. Xeneralidades. Mecanismo.</p> <p>? Reaccións de acoplamiento carbonilante.</p> <p>? Reaccións de hidroformilación.</p> <p>? Reaccións de carbonilación con complexos de carbonilo.</p> <p>? Carboxilación.</p> <p>? Reaccións de descarboxilación e acoplamiento descarboxilante.</p> <p>? Outras reaccións de inserción con circonio e titanio.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| Tema 4. Reaccións de complexos $\eta^3$ -alilo.                                      | <p>? Complexos <math>\eta^3</math>-alilo de Paladio (1. Síntese e propiedades. 2. Rexioselectividade e estereoselectividade)</p> <p>? 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).</p> <p>? Reaccións de substitución alílica catalizadas por complexos doutros metais de transición (Iridio, Níquel, Ferro, Molibdeno).</p> <p>? Reaccións de alilación con alquinos e alenos catalizadas por complexos de Rodio.</p> |



|                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 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.                                         | ? Características dos carbenos.<br>? Carbenos de metais de transición. Estrutura e tipos.<br>? Transformacións que involucran carbenos de metais de transición.<br>? 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.<br>? Reaccións de inserción de carbenos e nitrenos.<br>? Reacción de borilación catalizada por Ir.<br>? 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<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> <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<br>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<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 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