Guia docente				
Datos Identificativos				2020/21
Asignatura (*)	Aplicaciones Sintéticas de los Compuestos Organometálicos		Código	610509112
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	2º cuatrimestre	Primero	Optativa	3
Idioma	Castellano			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	Sarandeses Da Costa, Luis Alberto		Correo electrónico	luis.sarandeses@udc.es
Profesorado	Perez Sestelo, Jose Sarandeses Da Costa, Luis Alberto		Correo electrónico	jose.perez.sestelo@udc.es luis.sarandeses@udc.es
Web	www.usc.es/gl/centros/quimica/curso/master.html			
Descripción general	Esta materia es básica en la especialidad Química Sintética porque estudia la reactividad de los compuestos organometálicos y sus aplicaciones en síntesis y catálisis. Asimismo, los conceptos abordados en esta materia son de utilidad en otras de módulos vecinos como Estructura y Reactividad Química, Nanoquímica y Nuevos Materiales y Química Biológica. Esta materia está integrada en la especialidad Química Sintética. Se relaciona con las asignaturas Compuestos Organometálicos y Química de Coordinación Avanzada, que recogen aspectos generales de la estructura y reactividad de los compuestos organometálicos y de los complejos metálicos de coordinación. La utilización de los compuestos organometálicos y la catálisis por metales de transición son herramientas fundamentales de la química sintética actual, tanto en su aspecto académico como en el industrial. La síntesis orgánica actual se plantea el desarrollo de procesos más selectivos y sostenibles, objetivos para los que se requieren con frecuencia los compuestos organometálicos y la catálisis.			

Plan de contingencia	1. Modificaciones en los contenidos ? No se realizarán cambios. 2. Metodologías *Metodologías docentes que se mantienen ? Sesión magistral. ? Seminario. ? Prueba mixta. *Metodologías docentes que se modifican ? Todas las metodologías docentes se llevarán a cabo mediante Teams. 3. Mecanismos de atención personalizada al alumnado ? Correo electrónico: permanente. ? Moodle: Diariamente; según la necesidad del alumnado. ? Teams: Sesiones magistrales, seminarios, tutorías (2-6 h/semana). 4. Modificacines en la evaluación ? Seminario: 60% La evaluación continua tendrá un peso del 60% en la calificación de la materia y constará de los siguientes componentes: resolución de problemas y casos prácticos, cuestiones durante lo cursos y asistencia y participación. Pasa de 40% a 60%. ? Prueba mixta 40% Prueba mixta que versará sobre los contenidos explicados. Común al resto das universidades participantes en el máster. Pasa de 60% a 40%. *Observaciones de evaluación: La prueba mixta consistirá en un conjunto de preguntas a través de Moodle o Forms para responder en un tiempo determinado. No hay restricciones de mínimos en los apartados evaluados. Si el alumnado tuviese dificultades para la realización de la prueba mixta se haría uso de llamadas telefónicas o se emplearía un método de evaluación asíncrono. Alumnado con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia: elaboración de trabajos tutelados (60%) y prueba mixta (40%). 5. Modificaciones de la bibliografía o webgrafía Non hay modificaciones de la bibliografía.

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	CE2 -Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A3	CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
A6	CE6 - Diseñar procesos que impliquen el tratamiento o eliminación de productos químicos peligrosos
A8	CE8 - Analizar y utilizar los datos obtenidos de manera autónoma en los experimentos complejos de laboratorio relacionándolos con las técnicas químicas, físicas o biológicas apropiadas, e incluyendo el uso de fuentes bibliográficas primarias
B1	CB6 - 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	CB7 - 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.

B4	CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
B5	CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
B7	CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
B10	CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	CG6 - 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 del título		
Comprender el fundamento de los ciclos catalíticos desde el punto de vista de las coordenadas de reacción y las superficies de energía potencial.	AM1 AM6 AM8	BM5	
Entender las aplicaciones en síntesis de la diversidad de procesos de formación de enlaces mediadas por compuestos organometálicos.	AM2 AM3 AM6	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11	
Proponer secuencias sintéticas con desconexiones clave basadas en procesos sintéticos de compuestos organometálicos.	AM2 AM3 AM6	BM1 BM2 BM4 BM7 BM11	

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1. Principios y fundamentos energéticos de los ciclos catalíticos organometálicos.	? Conceptos generales ? Termodinámica y cinética del cíclo catalítico de reacciones catalizadas por metales de transición. ? Aplicación: Acoplamiento cruzado catalizado por Pd; Sinergia entre resultados computacionales y experimentales.
Tema 2. Reacciones de acoplamiento cruzado y reacción de Heck.	? Reacciones de acoplamiento cruzado. Generalidades. Grupos salientes. Metales. Selectividad. ? Reacciones de formación de enlaces carbono?carbono: organometálicos de Li, Zn, Al, Zr, Sn, Cu; compuestos de B y Si; otros metales; enolatos. ? Reacciones de formación de enlaces carbono?heteroátomo. ? Reacción de Heck. Componentes de la reacción. Reacciones inter- e intramoleculares. Reacciónes de Heck asimétricas. Reacciones de Heck con especies organometálicas.

Tema 3. Reacciones de inserción.	? Reacciones de carbonilación. Generalidades. Mecanismo. ? Reacciones de acoplamiento carbonilante. ? Reacciones de hidroformilación. ? Reacciones de carbonilación con complejos de carbonilo. ? Carboxilación. ? Reacciones de descarbonilación y acoplamiento descarbonilante. ? Otras reacciones de inserción con circonio y titanio.
Tema 4. Reacciones de complejos n3-alilo.	? Complejos n3-alilo de Paladio (1. Síntesis y propiedades. 2. Regioselectividad y estereoselectividad) ? Reacciones de sustitución alílica catalizadas por complejos de Paladio (1. Alquilación alílica. 2. Aminación, eterificación y reducción alílica. 3. Reacciones de ciclación a través de procesos de inserción en alquenos. 4. Reacciones de cicloadición a través de intermedios trimetilenometano). ? Reacciones de sustitución alílica catalizadas por complejos de otros metales de transición (Iridio, Níquel, Hierro, Molibdeno). ? Reacciones de alilación con alquinos y alenos catalizadas por complejos de Rodio.
Tema 5. Reacciones de complejos electrófilos de alquenos, alquinos, dienos y arenos.	? Reacciones de inserción en alquinos y reacciones tándem tipo Heck, Suzuki, etc.. ? Reacciones de inserción mediadas por otros metales (Zr y Ti). ? Adiciones electrófilas sobre alquenos y alquinos. ? Reacción de Nicholas y Pauson-Khand. ? Reacciones de alquenos con paladio en alto estado de oxidación. ? Aplicaciones sintéticas de complejos n4-dienilo y n6-areno.
Tema 6. Reactividad de carbenos metálicos.	? Características de los carbenos. ? Carbenos y metales de transición. Estructura y tipos. ? Transformaciones que involucran carbenos de metales de transición. ? Metátesis de olefinas.
Tema 7. Reacciones de activación de enlaces C?H.	? Introducción a la activación de enlaces C-H: relevancia, dificultades y principales mecanismos de activación. ? Reacciones de inserción de carbenos y nitrenos ? Reacciones de borilación catalizada por Ir ? Funcionalización de alcanos y arenos catalizada por Pd(II): oxigenación, arilación, halogenación, reacción de Heck oxidante.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competéncias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Seminario	A1 A2 A3 A6 A8 B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11	7	18	25
Prueba mixta	A1 A2 A3 B2 B5	3	0	3
Sesión magistral	A1 A8 B1 B2 B7 B10 B11	12	33	45
Atención personalizada		2	0	2
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción

Seminario	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.) Asimismo, durante los seminarios se contempla la posibilidad de llevar a cabo otras metodologías: ? Realización de trabajos, tanto individualmente, como en grupo, sobre temas científicos relacionados con las distintas materias del Máster. ? Exposición oral de trabajos, informes, etc., incluyendo debate con profesores y alumnos. ? Utilización de programas informáticos especializados e internet. Soporte docente on-line (Campus Virtual).
Prueba mixta	Se programa 1 examen escrito final, que permitirá evaluar objetivamente el grado de asimilación y la capacidad de aplicación de los contenidos de la materia por parte del alumno. La prueba objetiva incluirá un único tipo de preguntas, que estarán relacionadas con la estructura, la reactividad y la síntesis de compuestos orgánicos, y que permitirán determinar si las respuestas son correctas.
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**
Seminario Sesión magistral	Se programan 2 tutorías individuales o en grupo reducido para comprobar la comprensión de la materia y complementar la formación del alumno mediante resolución de dudas y otras cuestiones.

Evaluación			
Metodologías	**Competéncias**	**Descripción**	**Calificación**
Seminario	A1 A2 A3 A6 A8 B1 B2 B4 B5 B7 B10 B11	La evaluación continua tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará los siguientes componentes: resolución de problemas y casos prácticos (15%), exposición oral [(casos prácticos, problemas), 10%] y cuestiones orales durante el curso (10%) y asistencia y participación (10%).	40
Prueba mixta	A1 A2 A3 B2 B5	El examen final versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.	60

Observaciones evaluación
La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final. Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez. La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará los siguientes componentes: resolución de problemas y casos prácticos (15%), exposición oral [(casos prácticos, problemas), 10%] y cuestiones orales durante el curso (10%) y asistencia y participación (10%). El examen final (N2) versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura. La calificación del alumno se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente: Nota final = máximo (0.4 x N1 + 0.6 x N2) Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0?10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0?10). Alumnos con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia: Se considerarán exentos de las sesiones magistrales si bien se les facilitará la asistencia al mayor número posible de seminarios. De no poder asistir a los seminarios el alumno hará un trabajo tutorizado. Esto se aplicará a ambas oportunidades.

Fuentes de información	
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
Complementária	- 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

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Procesos Industriales y Sostenibilidad/610509104 Química Organometálica/610509111 Determinación Estructural Avanzada/610509103 Estructura y Reactividad de los Compuestos Orgánicos/610509114
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Síntesis estereoselectiva/610509113
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