

27234 - Química organometálica

Información del Plan Docente

Año académico	2017/18
Centro académico	100 - Facultad de Ciencias
Titulación	452 - Graduado en Química
Créditos	5.0
Curso	4
Periodo de impartición	Segundo Semestre
Clase de asignatura	Optativa
Módulo	---

1. Información Básica

1.1. Introducción

Breve presentación de la asignatura

En la asignatura de Química Organometálica se estudian la síntesis, modelos de enlace, propiedades y reactividad de los complejos organometálicos clasificados en dos grandes bloques, los enlaces metal carbono de tipo sigma, sigma-pi y pi-cíclicos, haciendo especial referencia a los aspectos estructurales, reactividad inusual y aplicaciones actuales así como a posibles desarrollos futuros.

1.2. Recomendaciones para cursar la asignatura

Se recomienda haber cursado la asignatura Química Inorgánica II.

Se requiere el dominio de conceptos básicos de estructura, enlace y reactividad de compuestos de coordinación.

La asistencia a clase y el trabajo continuado facilita la superación de la asignatura.

1.3. Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura Química Organometálica se encuadra en el módulo avanzado del Grado en Química. Tiene carácter optativo, es cuatrimestral y tiene una carga lectiva de 5 ECTS: 4 teóricos, dedicados a clases teóricas y de problemas con participación de los alumnos y 1 de carácter práctico que se desarrollará en el laboratorio. Los contenidos de la asignatura Química Organometálica amplían los conocimientos adquiridos en la asignatura Química Inorgánica II y son fundamentales para comprender las alteraciones que causa la presencia del metal en las propiedades y en la reactividad de moléculas o fragmentos orgánicos, influyendo así en procesos de Q. Orgánica, Bioquímica y Catálisis. Es de especial interés para la realización de diversos trabajos de fin de Grado en el área de conocimiento de Química Inorgánica.

1.4. Actividades y fechas clave de la asignatura

Se realizarán varios controles a lo largo del curso. Las fechas de los mismos se comunicarán con suficiente antelación. El calendario de prácticas se establecerá a principio de curso, una vez conocido el número de alumnos matriculados y se expondrá en el tablón de anuncios y en el Anillo Digital Docente. El calendario de pruebas globales, comienzo de curso, etc. puede consultarse en la página web de la Facultad de Ciencias.

27234 - Química organometálica

2.Resultados de aprendizaje

2.1.Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

Conoce los fundamentos y características de los diversos enlaces M-C.

Reconoce las diferentes familias de compuestos organometálicos.

Comprende y utiliza la regla del NAE.

Conoce y predice la estabilidad y reactividad de los distintos tipos de compuestos organometálicos y es capaz de proponer métodos de síntesis.

Aplica la información de técnicas analíticas y de caracterización espectroscópicas al análisis de los compuestos organometálicos.

Resuelve y discute de forma crítica problemas y cuestiones sobre estructura y reactividad de compuestos organometálicos.

Reconoce la utilidad de los compuestos organometálicos para la síntesis de moléculas orgánicas y como catalizadores en procesos químicos.

2.2.Importancia de los resultados de aprendizaje

La asignatura debe proporcionar al alumno los conocimientos adecuados que le permitan identificar y relacionar la estructura, propiedades, reactividad y de los compuestos organometálicos.

Se pretende que los estudiantes puedan predecir la estabilidad y reactividad de los distintos tipos de compuestos organometálicos, y proponer métodos de síntesis. Además, adquirirán la destreza en la utilización de las diferentes técnicas para el estudio y la caracterización de dichos compuestos, pudiendo predecir la utilidad de los compuestos organometálicos en distintos aspectos de la Ciencia y Tecnología actuales.

3.Objetivos y competencias

3.1.Objetivos

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

En esta asignatura se pretende que el alumno conozca los fundamentos de la Química Organometálica a partir de los distintos grupos orgánicos que actúan como ligandos de los centros metálicos. El conocimiento de los distintos tipos de enlace M-C dependiendo de los grupos orgánicos implicados, de su estructura y de las propiedades relacionadas permiten adquirir una visión global de la Química Organometálica, y en especial de la de los elementos de transición.

3.2.Competencias

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

Reconocer los compuestos organometálicos y predecir su estabilidad.

27234 - Química organometálica

Predecir la diferente reactividad de los compuestos organometálicos.

Diseñar posibles rutas sintéticas para los compuestos organometálicos simples.

Utilizar los datos analíticos y espectroscópicos de las técnicas habituales para elucidar la composición y estructura de los compuestos organometálicos.

Conocer las aplicaciones prácticas de los compuestos organometálicos en síntesis y catálisis.

4.Evaluación

4.1.Tipo de pruebas, criterios de evaluación y niveles de exigencia

Los alumnos serán evaluados de la siguiente manera:

Evaluación Continua

1.- **Controles (C1 y C2)** . Se realizarán dos pruebas a lo largo del curso que eliminan materia para la convocatoria de junio o septiembre.

Primer control (C1). Esta prueba contendrá cuestiones teórico-prácticas y problemas relacionados con los temas 1- 6 del programa. Elimina materia para las convocatorias finales de junio, o septiembre, y contribuye con un 45% a la nota global siempre que la calificación sea igual o superior a 5.

Segundo control (C2). Esta prueba se realizará durante el periodo reservado a las pruebas de evaluación continua y contendrá cuestiones teórico-prácticas y problemas relacionados con los temas 7 - 10 del programa. Elimina materia para las convocatorias de junio, o septiembre, y contribuye con un 45% a la nota global siempre que la calificación sea igual o superior a 5.

2.- Valoración del **informe de las prácticas (P)** , contribuye con un 10% a la nota global.

La calificación final será la conseguida mediante ponderación de las notas obtenidas de acuerdo con la siguiente fórmula:

$$\text{Nota} = \mathbf{P} (10 \%) + \mathbf{C1} (45 \%) + \mathbf{C2} (45 \%)$$

(**P** : nota del informe de prácticas; **C1** : nota de la 1ª parte; **C2** : nota de la 2ª parte).

27234 - Química organometálica

Prueba global (PG). (Convocatorias de junio y septiembre)

Esta prueba se estructura en dos partes. Los alumnos que no hayan aprobado en la evaluación continua las pruebas **C1** y/o **C2** , o deseen mejorar su calificación, deberán repetir el examen de la parte correspondiente en la prueba global.

Cuando se realiza el examen de cualquiera de las partes, **C1** o **C2**, en la prueba global, es necesario obtener un mínimo de 5 sobre 10 para aprobar. Solo en el caso de realizar el examen de las dos partes, **C1** y **C2**, se admitirá un 4 sobre 10 en una de ellas, siempre que al realizar la media ponderada de las notas obtenidas en cada parte, el resultado sea una nota igual o superior a 5.

La calificación final será la mejor de entre las dos notas siguientes:

A) la conseguida mediante ponderación de las notas obtenidas de acuerdo con la siguiente fórmula:

$$\text{Nota} = \mathbf{P} (10 \%) + \mathbf{C1} (45 \%) + \mathbf{C2} (45 \%)$$

B) La resultante de aplicar la siguiente fórmula:

$$\text{Nota 2} = \mathbf{C1} (50 \%) + \mathbf{C2} (50 \%)$$

(**P** : nota del informe de prácticas; **C1** : nota de la 1ª parte; **C2** : nota de la 2ª parte)

El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula) así como el consumo de dichas convocatorias se ajustará a la Normativa de Permanencia en Estudios de Grado y Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje. A este último reglamento, también se ajustarán los criterios generales de diseño de las pruebas y sistema de calificación, y de acuerdo a la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones. Dicha normativa puede consultarse en: <http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

5. Metodología, actividades, programa y recursos

5.1. Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

- Clases teóricas (4 ECTS)
- Prácticas de laboratorio (1 ECTS)

5.2. Actividades de aprendizaje

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades:

27234 - Química organometálica

1.- Actividad formativa de adquisición de conocimientos básicos de Química Organometálica. Esta actividad comprende 40 horas presenciales de clases expositivas-interactivas en grupo grande, parte de las mismas se dedicarán a la resolución de problemas asociados a los temas correspondientes.

2.- Actividad formativa de laboratorio. Se realizará en el laboratorio de la 3ª planta del edificio D, en tres sesiones de 3,3 horas y tendrán carácter obligatorio. Esta actividad es de asistencia obligatoria en la que los alumnos, de forma individual, llevaran a cabo la síntesis de una serie de ligandos y complejos que deberán caracterizar a partir de los datos espectroscópicos que se les facilitarán.

3.- Tutorías. Los alumnos dispondrán de 6 horas semanales para tutorías individualizadas.

5.3. Programa

TEORÍA

TEMA 1 .- Desarrollo histórico de la Química Organometálica. Clasificación de los compuestos organometálicos. Tipos de ligandos, geometría. Tipos de enlaces que presentan. Energía y reactividad de los enlaces Metal-Carbono.

TEMA 2 .- Compuestos organometálicos de los elementos de grupos principales. Métodos generales de preparación. Técnicas de trabajo. Purificación de los compuestos. Análisis y caracterización estructural.

TEMA 3 .- Enlace y estructura de los compuestos organometálicos de los metales de grupos principales. Propiedades de estos compuestos.

TEMA 4 .- Compuestos organometálicos de los metales de transición. La regla de los 18 electrones de valencia (NAE). Cumplimiento y excepciones a esta regla.

TEMA 5 .- Compuestos organometálicos de los metales de transición con ligandos σ ; dadores. Preparación de alquilos y arilos de metales de transición. Estabilidad termodinámica frente a labilidad cinética. Reactividad de alquilos y arilos de metales de transición. Reacciones de inserción. Alquenos y alquinos de metales de transición. Preparación y propiedades. Especies con enlaces metal-hidruro.

TEMA 6.- Compuestos organometálicos con interacciones σ . Especies metal-dihidrógeno. Especies con interacciones M- σ (H-C) (σ agósticas). Complejos con interacciones M- σ (H-X) (X = B, Si...) y otros casos. Procesos de adición oxidante de enlaces H-H, H-C, H-X y otros casos.

TEMA 7 .- Carbonilos metálicos. Modos de coordinación. Enlace en los carbonilos metálicos. Preparación, estructura y reactividad. Carbonilmetalatos y carbonil metal hidruros. Isocianuro complejos de metales de transición.

TEMA 8 .- Carbenos de metales de transición. Tipos de carbenos. Preparación, estructura y reactividad. Carbinos metálicos. Preparación, estructura, enlace y reactividad.

TEMA 9 .- Compuestos de metales de transición con olefinas. Preparación. Enlace, estructura y reactividad de complejos de monoolefinas y de diolefinas conjugadas. Alquinos complejos de metales de transición. Alquinos como ligandos terminales y puentes. Alil y enil derivados de metales de transición. Preparación, enlace, estructura y reactividad.

27234 - Química organometálica

TEMA 10 .- Compuestos de metales de transición con anillos aromáticos. Tipos de compuestos: sandwich y semi-sandwich. Complejos metálicos con anillos aromáticos de tres y cuatro miembros. Complejos con el ligando ciclopentadienilo. Ciclopentadienil complejos binarios. Complejos con el ligando benceno y sus derivados. Bis(areno)metal complejos. Compuestos semi-sandwich areno metal carbonilos. Complejos metálicos con anillos aromáticos de siete y de ocho miembros.

PROBLEMAS

Número atómico efectivo, Reacciones de inserción, Reacciones de adición oxidante, Reacciones de ataque nucleofílico: reglas de Davies, Green y Mingos, Cuestiones de ligandos *pi* .

5.4. Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Los horarios de la asignatura y fechas de exámenes se publican en el tablón de anuncios y en la página web de la Facultad de Ciencias: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Material complementario

En reprografía y/o a través del Anillo Digital Docente se proporcionará al alumno diverso material docente preparado por los profesores de la asignatura.

5.5. Bibliografía y recursos recomendados

<https://psfunizar7.unizar.es/br13/egSolotexto.php?codigo=27234>

- | | |
|-----------|---|
| BB | Bochmann, M.. Organometallics and Catalysis, an introduction. Oxford University Press, 2015 |
| BB | Crabtree, Robert H.. Química Organometálica de los metales de transición / Robert H. Crabtree ; Eduardo Peris Fajarnés [trad.] Castelló de la Plana : Publicacions de la Universitat Jaume I, D. L. 1997 |
| BB | Elschenbroich, Christoph. Organometallics / Christoph Elschenbroich ; translated by Jose Oliveira and Christoph Elschenbroich . 3rd completely rev. and extended ed. Weinheim [etc.] : Wiley-VCH, cop. 2006 |
| BB | Hill, Anthony F.. Organotransition metal |

27234 - Química organometálica

chemistry / Anthony F. Hill Cambridge:
Royal Society of Chemistry, cop. 2002

- BC** Bochmann, Manfred. Organometallics. 1, Complexes with transition metal- carbon [s]-bonds / Manfred Bochmann . - [1st ed. repr.] Oxford [etc.] : Oxford University Press, 2000
- BC** Bochmann, Manfred. Organometallics. 2, Complexes with transition metal- carbon [p]-bonds / Manfred Bochmann . - 1st ed. repr. Oxford [etc.] : Oxford University Press, 2000
- BC** Carriedo Ule, Gabino A.. Curso de iniciación a la química organometálica / Gabino A. Carriedo Ule, Daniel Miguel San José . - [1ª ed.] Oviedo : Universidad de Oviedo, Servicio de Publicaciones, D.L.1995
- BC** Pruchnik, Florian P. Organometallic chemistry of the transition elements / Florian P.Pruchnik ; translated from polish by Stan A.Duraj . - [1st ed.] New York [etc.] : Plenum Press, cop.1990
- BC** Spessard, Gary O.. Organometallic chemistry / Gary O. Spessard, Gary L. Miessler New Jersey : Prentice-Hall, cop.1997

LISTADO DE URLs:

Organometallic HyperTextBook
[<http://www.ilpi.com/organomet/>]