



1. Identificación

1.1. De la Asignatura

Curso Académico	2016/2017
Titulación	MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA FINA Y MOLECULAR
Nombre de la Asignatura	COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS Y CATÁLISIS HOMOGÉNEA
Código	5426
Curso	PRIMERO
Carácter	OPTATIVA
N.º Grupos	1
Créditos ECTS	3
Estimación del volumen de trabajo del alumno	75
Organización Temporal/Temporalidad	Cuatrimestre
Idiomas en que se imparte	ESPAÑOL
Tipo de Enseñanza	Presencial

1.2. Del profesorado: Equipo Docente

Coordinación de la asignatura ELOISA MARTINEZ VIVIENTE Grupo: 1	Área/Departamento	QUÍMICA INORGÁNICA
	Categoría	PROFESORES TITULARES DE UNIVERSIDAD
	Correo	eloisamv@um.es
	Electrónico / Página web / Tutoría electrónica	Tutoría Electrónica: SÍ



	Teléfono, Horario y Lugar de atención al alumnado	Duración	Día	Horario	Lugar	Observaciones
		Anual	Miércoles	13:00- 14:30		868888405, Facultad de Química
		Anual	Jueves	13:00- 14:30		868888405, Facultad de Química
VENANCIO RODRIGUEZ HERNANDEZ Grupo: 1	Área/Departamento	QUÍMICA INORGÁNICA				
	Categoría	PROFESORES TITULARES DE UNIVERSIDAD				
	Correo Electrónico / Página web / Tutoría electrónica	venancio@um.es Tutoría Electrónica: SÍ				
	Teléfono, Horario y Lugar de atención al alumnado	Duración	Día	Horario	Lugar	Observaciones
		Anual	Martes	13:00- 14:00	868887463, Facultad de Química B1.3B.034	null
		Anual	Miércoles	13:00- 14:00	868887463, Facultad de Química B1.3B.034	null
		Anual	Jueves	13:00- 14:00	868887463, Facultad de Química B1.3B.034	null



2. Presentación

Los compuestos organometálicos ocupan una posición prominente en la química moderna, ya que durante los últimos años han abierto nuevas perspectivas en la química fundamental y en la industria química. Desde el punto de vista fundamental, la gran diversidad de tipos de enlace encontrada en estos compuestos ha contribuido a mejorar la comprensión de las estructuras de las moléculas y su comportamiento en disolución. Desde un punto de vista aplicado, los compuestos organometálicos se utilizan como reactivos extraordinariamente útiles para la activación y formación selectiva de enlaces C-C, C-H, C-O, C-N, C-halógeno y de otros enlaces C-metal. Además, muchos de ellos muestran actividad catalítica en reacciones que son ampliamente utilizadas en la industria química, tales como las de oxidación, reducción, isomerización, oligomerización, acoplamiento y polimerización, entre otras.

Esta asignatura pretende dar una visión completa de la Química Organometálica. Comenzando por los aspectos fundamentales (enlace, estructura y propiedades espectroscópicas), continuando por la síntesis y reactividad, y terminando por las aplicaciones. Se prestará especial atención a las aplicaciones en catálisis homogénea y se estudiarán los principales procesos catalíticos donde los compuestos organometálicos juegan un papel importante.

3. Condiciones de acceso a la asignatura

3.1 Incompatibilidades

No existen

3.2 Recomendaciones

Para cursar esta asignatura es conveniente poseer conocimientos básicos de química inorgánica, química orgánica, química de la coordinación y determinación estructural.

4. Competencias

4.1 Competencias Básicas

- 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.



- 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.
- CB8. 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.
- 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.
- 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.

4.2 Competencias de la titulación

- CBM-1. 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.
- CBM-2. 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.
- CBM-3. 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.
- CBM-4. Posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- CGM-1. Adquirir conocimientos avanzados en los diferentes campos de la Química Fina y Molecular.
- CGM-2. Saber reconocer que algunos de los retos actuales más importantes para el crecimiento del tejido económico de un país los constituyen industrias vinculadas a la Química Fina y Molecular: industrias farmacéuticas, agroquímicas, cosméticos, biomedicina, etc.
- CGM-3. Capacidad para estar actualizados e interpretar críticamente la teoría y práctica de la Química Fina y Molecular.
- CGM-4. Habilidades para desarrollar estrategias, tanto en el ámbito de la investigación básica como en la industria química, en los campos científicos de Química Fina y Molecular.
- CGM-6. Capacidad para innovar, desarrollar y/o mejorar técnicas y/o metodologías aplicables a la resolución de un problema concreto.
- CGM-11. Adquirir la capacidad de comprender y asimilar el contenido de las publicaciones científicas relacionadas con los campos de investigación en Química Fina y Molecular.
- CGM-12. Ser capaz de reflexionar sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos.
- CGM-13. Ser capaces de aplicar los conocimientos y capacidades adquiridos para reconocer los retos actuales más importantes en Química Fina y Molecular.
- CGM-15. Adquirir las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar formándose para enfrentarse con garantías de éxito a sus retos científicos y profesionales.
- CEM-8. Capacidad para entender los mecanismos de reacción en la síntesis de compuestos químicos y diseñar rutas sintéticas que permitan obtener los compuestos buscados.
- CEM-9. Ser capaz de diseñar procesos químicos sostenibles en Química Fina y Molecular.
- CEM-10. Ser capaz de describir de manera comprensible el resultado de transformaciones químicas complejas.
- CME-12. Ser capaces de relacionar la estructura con las propiedades físicas y químicas de nuevos compuestos químicos



4.3 Competencias transversales y de materia

- Competencia 1. Aplicar los conocimientos y capacidades adquiridos sobre los compuestos organometálicos para resolver problemas en el ámbito de la Síntesis Orgánica y la Catálisis Homogénea.
- Competencia 2. Poseer un conocimiento avanzado de la reactividad de los compuestos organometálicos y sus aplicaciones en Química Fina.
- Competencia 3. Ser capaz de entender el mecanismo de los principales procesos catalíticos homogéneos y proponer catalizadores específicos para una reacción concreta
- Competencia 4. Comprender artículos de investigación en donde intervengan compuestos organometálicos y emitir juicios razonados sobre los mismos.
- Competencia 5. Comunicar sus conclusiones y los conocimientos en Química Organometálica y Catálisis Homogénea a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Competencia 6. Conocer las aplicaciones de técnicas estructurales avanzadas a la resolución de problemas en Química Organometálica.

5. Contenidos

Bloque 1: INTRODUCCIÓN

TEMA 1. Aspectos generales.

Perspectiva histórica

Clasificación de los compuestos organometálicos.

El enlace M-C.

La regla de los 18 electrones.

Contaje electrónico.

Bloque 2: COMPLEJOS CON LIGANDOS DADORES SIGMA

TEMA 2. Métodos generales de síntesis.

Reacción de haluros orgánicos con metales.

Reacciones de transmetalación.

Reacciones de metalación.

Reacciones de adición oxidante.

Adiciones 1,2 a compuestos insaturados.

TEMA 3. Propiedades.

Estructura.

Estabilidad.



Reactividad y aplicaciones en síntesis orgánica y catálisis homogénea.

Bloque 3: COMPLEJOS CON LIGANDOS ACEPTORES π ENLAZADOS LONGITUDINALMENTE

TEMA 4. Carbonilos metálicos.

Estructura y enlace.

Métodos de síntesis.

Reactividad.

TEMA 5. Complejos con isonitrilos.

Estructura y enlace.

Métodos de síntesis.

Reactividad.

TEMA 6. Complejos con carbenos y carbinos.

Introducción.

Clasificación.

Estructura y enlace.

Métodos de síntesis.

Reactividad.

Carbenocomplejos como catalizadores de reacciones de metátesis.

Bloque 4: COMPLEJOS CON LIGANDOS ACEPTORES π ENLAZADOS LATERALMENTE

TEMA 7. Complejos con alquenos

Estructura y enlace.

Métodos de síntesis.

Reactividad.

Aplicaciones en síntesis orgánica.

Proceso Wacker.

TEMA 8. Complejos con alquinos.



Estructura y enlace.

Métodos de síntesis.

Reactividad.

Importancia en catálisis.

TEMA 9. Complejos con grupos alilo y similares.

Estructura y enlace.

Métodos de síntesis.

Reactividad.

Aplicaciones en catálisis homogénea.

TEMA 10. Complejos con sistemas carbocíclicos.

Introducción.

Complejos con ciclopropenilo.

Complejos con ciclobutadieno.

Complejos con ciclopentadienilo: metalocenos lineales, metalocenos angulares y monociclopentadienilos metálicos.

Complejos con arenos.

Complejos con tropilio.

Complejos con ciclooctatetraeno.

Bloque 5: CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y COMPORTAMIENTO EN DISOLUCIÓN

TEMA 11. RMN aplicada a complejos organometálicos.

Desplazamientos químicos en ligandos coordinados y en el metal.

Constantes de acoplamiento metal-ligando y ligando-ligando.

Utilidad de los experimentos bidimensionales.

Particularidades de los sistemas de segundo orden.

Efecto de isótopos y de la relajación.



Medidas de difusión.

TEMA 12. Comportamiento dinámico en disolución. RMN dinámica.

Introducción.

Procesos lentos: métodos de doble resonancia y EXSY.

Procesos rápidos: análisis de forma de línea y programas de simulación. Parámetros de activación.

Mecanismos.

Bloque 6: CATALISIS HOMOGÉNEA Y QUÍMICA FINA

TEMA 13. Importancia y aplicaciones de los complejos organometálicos como catalizadores.

Catálisis homogénea vs catálisis heterogénea.

Reacciones de hidrogenación

Isomerización de alquenos.

Reacciones de acoplamiento cruzado catalizadas por complejos de Pd.

Hidroformilación de alquenos (proceso oxo)

Otras reacciones con CO

6. Metodología Docente

Actividad Formativa	Metodología	Horas Presenciales	Trabajo Autónomo	Volumen de trabajo
Exposición de contenidos	Clase magistral con soporte audiovisual y participación activa del alumno	15	23	38
Seminarios	Los alumnos resolverán problemas y casos prácticos en clase coordinados por el profesor.	6	21	27
Tutorías	Resolución de problemas y casos individualmente o en equipo con apoyo personalizado del profesor. El profesor resolverá las dudas de los alumnos sobre los artículos de investigación que éstos deben leer y comentar.	3	7	10



Actividad Formativa	Metodología	Horas Presenciales	Trabajo Autónomo	Volumen de trabajo
	Total	24	51	75

7. Horario de la asignatura

<http://www.um.es/web/quimica/contenido/estudios/masteres/quimica-fina/2016-17#horarios>

8. Sistema de Evaluación

Métodos / Instrumentos	Prueba escrita
Criterios de Valoración	Se valorarán los conocimientos del alumno y su capacidad de aplicarlos a la resolución de cuestiones y problemas
Ponderación	55
Métodos / Instrumentos	Resolución de problemas
Criterios de Valoración	Se evaluará la capacidad de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas y la capacidad para comunicarlos con claridad y para responder a las preguntas formuladas sobre ellos.
Ponderación	20
Métodos / Instrumentos	Elaboración de informes sobre artículos de investigación
Criterios de Valoración	Se valorará la comprensión del contenido, la correcta redacción del informe (estructura y claridad) y la capacidad para emitir un juicio crítico
Ponderación	20
Métodos / Instrumentos	Observación del trabajo del estudiante
Criterios de Valoración	Se valorará la actitud y el grado de participación del alumno en las distintas actividades
Ponderación	5



Fechas de exámenes

<http://www.um.es/web/quimica/contenido/estudios/masteres/quimica-fina/2016-17#exámenes>

9. Bibliografía

Bibliografía Complementaria



ASTRUC, D. Química organometálica, Reverté, 2003



COLLMAN, J. P., HEGEDUS, L. S., NORTON, J. R. Y FINKE, R. G., *Principles and Applications of Organotransition Metal Chemistry*, University Science Books, 1987.



JOHN F. HARTWIG. Organotransition Metal Chemistry. From Bonding to Catalysis. University Science Books. Mill Valley, California, USA. 2010. ISBN 978-1-891389-53-5



ELSCHENBROICH, CH., SALZER, A., *Organometallics*, Wiley-V.C.H., 2006



CRABTREE, R. H., *The organometallic chemistry of the transition metals*, John Wiley, Hoboken, N.J., 2005. Traducción por Peris Fajarnés, E. V., *Química organometálica de los metales de transición*, Universidad Jaume I, Castellón de la Plana, 1997.

10. Observaciones y recomendaciones