

27234 - Química organometálica

Información del Plan Docente

Año académico: 2022/23

Asignatura: 27234 - Química organometálica

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

Materia:

1. Información Básica

1.1. Objetivos de la asignatura

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.

Estos planteamientos y objetivos están alineados con los siguientes Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) de la Agenda 2030 de Naciones Unidas (<https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/>), de tal manera que la adquisición de los resultados de aprendizaje de la asignatura proporciona capacitación y competencia para contribuir en cierta medida a su logro y, específicamente, a los siguientes objetivos:

- Objetivo 3: Salud y bienestar
- Objetivo 4: Educación de calidad
- Objetivo 5: Igualdad de género
- Objetivo 7: Energía asequible y no contaminante
- Objetivo 8: Trabajo decente y crecimiento económico
- Objetivo 9: Industria, innovación e infraestructuras
- Objetivo 10: Reducción de las desigualdades
- Objetivo 11: Ciudades y comunidades sostenibles
- Objetivo 11: Producción y consumo responsables
- Objetivo 12: Acción por el clima

1.2. 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 semestral 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 Química 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.

1.3. 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.

2. Competencias y resultados de aprendizaje

2.1. Competencias

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

- Reconocer los compuestos organometálicos y predecir su estabilidad.
- 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.

2.2. Resultados de aprendizaje

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.

2.3. Importancia de los resultados de aprendizaje

La asignatura debe proporcionar a los estudiantes los conocimientos adecuados para identificar y relacionar la estructura, propiedades y reactividad de los compuestos organometálicos. De ese modo, podrán predecir la estabilidad y reactividad de los distintos tipos de compuestos organometálicos y proponer métodos de síntesis. Además, adquirirán la destreza necesaria 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. Evaluación

3.1. Tipo de pruebas y su valor sobre la nota final y criterios de evaluación para cada prueba

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 las convocatorias de mayo-junio y junio-julio.

Primer control (C1). Esta prueba contendrá cuestiones teórico-prácticas y problemas relacionados con los temas 1-6 del programa. 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. 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 obtenida de acuerdo con la siguiente fórmula:

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

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

Prueba global (PG) (Convocatorias de mayo-junio y junio-julio)

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 realizar el examen de la parte correspondiente en la prueba global.

Quando se realiza el examen de cualquiera de las partes, C1 o C2, en la prueba global, es necesario obtener un mínimo de 5 puntos 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 más favorable al aplicar las dos fórmulas siguientes:

$$\text{A) Nota 1} = \text{P (10 \%)} + \text{C1 (45 \%)} + \text{C2 (45 \%)}$$

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

(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>

Cuando las pruebas o exámenes no puedan realizarse de forma presencial se realizarán a través de la plataforma Moodle-2 de la U.Z. Al examen global de la asignatura en la convocatoria de junio se presentarán aquellos estudiantes que no hayan superado alguno de los exámenes y aquellos que, habiendo aprobado, deseen mejorar su calificación. Estos últimos estudiantes deberán comunicar a los profesores su intención de presentarse a dicha convocatoria con unos días de antelación.

4. Metodología, actividades de aprendizaje, programa y recursos

4.1. 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)

4.2. Actividades de aprendizaje

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

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. Si no fuera posible la docencia presencial, la actividad se impartirá mediante presentaciones Power-point con la explicación grabada o mediante videoconferencia.

2.- Actividad formativa de laboratorio. Se realizará en tres sesiones y tendrá carácter obligatorio. Los alumnos, de forma individual, llevarán a cabo la síntesis de una serie de ligandos y complejos que deberán caracterizar a partir de los datos espectroscópicos que se les facilitará. Si no fuera posible desarrollar esta actividad de forma presencial, los contenidos relativos a las prácticas se impartirán mediante una presentación Power-point con la explicación grabada o mediante videoconferencia y el material necesario para realizar los informes se incorporará a Moodle.

3.- Tutorías. Los alumnos dispondrán de 6 horas semanales para tutorías individualizadas. Cuando no sea posible atender las tutorías de forma presencial, las consultas se realizarán preferentemente a través del foro de la asignatura en la plataforma Moodle-2 y, alternativamente, por correo electrónico o videoconferencia.

Las actividades docentes y de evaluación se llevarán a cabo de modo presencial salvo que, debido a la situación sanitaria, las disposiciones emitidas por las autoridades competentes y por la Universidad de Zaragoza obliguen a realizarlas de forma telemática o semi-telemática con aforos reducidos rotatorios.

4.3. 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 π 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. Alquenilos y alquiniolos de metales de transición. Preparación y propiedades. Especies con enlaces metal-hidruro.

TEMA 6.- Compuestos organometálicos con interacciones sigma. Especies metal-dihidrógeno. Especies con interacciones M-sigma(H-C) (agósticas). Complejos con interacciones M-sigma(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. Alquino complejos de metales de transición. Alquinos como ligandos terminales y puentes. Alil y enil derivados de metales de transición. Preparación, enlace, estructura y reactividad.

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*.

4.4. Planificación de las actividades de aprendizaje y calendario de fechas clave

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>

Las fechas de los controles 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.

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.

4.5. Bibliografía y recursos recomendados

<http://psfunizar10.unizar.es/br13/egAsignaturas.php?codigo=27234>