



Grado en Química 27234 - Química organometálica

Guía docente para el curso 2013 - 2014

Curso: 4, Semestre: 2, Créditos: 5.0

Información básica

Profesores

- José María Casas Del Pozo casas@unizar.es

- Juan Octavio Forniés Gracia forniesj@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta 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.

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: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

- 1: Conoce los fundamentos y características de los diversos enlaces M-C.
- 2: Reconoce las diferentes familias de compuestos organometálicos.
- 3: Comprende y utiliza la regla del NAE.
- 4:

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

- 5:** Aplica la información de técnicas analíticas y de caracterización espectroscópicas al análisis de los compuestos organometálicos.
- 6:** Resuelve y discute de forma crítica problemas y cuestiones sobre estructura y reactividad de compuestos organometálicos.
- 7:** Reconoce la utilidad de los compuestos organometálicos para la síntesis de moléculas orgánicas y como catalizadores en procesos químicos.

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.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales 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.

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.

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

- 1:** Reconocer los compuestos organometálicos y predecir su estabilidad.
- 2:** Predecir la diferente reactividad de los compuestos organometálicos.
- 3:** Diseñar posibles rutas sintéticas para los compuestos organometálicos simples.

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

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

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

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.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

1: Los alumnos serán evaluados de la siguiente manera:

1.- Controles de resolución de problemas, cuestiones teórico-prácticas y actividades relacionadas (15 %).

2.- Valoración del informe de las prácticas (15%)

3.- Una prueba escrita dentro del periodo de pruebas globales consistente en la resolución de problemas y cuestiones (70 %).

4.- La calificación final será la mejor de las siguientes notas:

NOTA 1= $0,15 \cdot \text{nota de controles} + 0,15 \cdot \text{nota de informe prácticas} + 0,7 \cdot \text{nota prueba escrita global}$.

NOTA 2= nota prueba escrita global que incluirá cuestiones relacionadas con las prácticas.

2: 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 (http://www.unizar.es/sg/doc/BOUZ10-10_001.pdf) 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>

Actividades y recursos

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)

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

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

1:

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, llevarán 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.

2:

El programa teórico de la asignatura comprende los siguientes temas:

TEMA 1.- Desarrollo histórico de la Química Organometálica. Clasificación de los compuestos organometálicos. 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. Alquilos y alquilos de metales de transición. Preparación y propiedades.

TEMA 6.- 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 7.- Carbenos de metales de transición. Tipos de carbenos. Preparación, estructura y reactividad. Carbinos metálicos. Preparación, estructura, enlace y reactividad.

TEMA 8.- 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.

TEMA 9.- 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.

TEMA 11.- 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 π .

- 3:** **PRÁCTICAS (3 sesiones de 3,3 horas):** 1.- Síntesis de un cloruro de fosfonio. 2.- Obtención de un iluro de fósforo. 3.- Preparación de un bis-iluro complejo de plata(I). Caracterización de todas las especies a partir de datos espectroscópicos.

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>

Bibliografía

La bibliografía recomendada es la siguiente:

- 1:** En reprografía y/o a través del Anillo Digital Docente se proporcionará al alumno diverso material docente preparado por los profesores de la asignatura (<https://bb.unizar.es/>).

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- 1.- *Organometallics: A Concise Introduction*. 3ª edition. Ch. ELSCHENBROICH y A. SALZER: VCH. 2005.
- 2.- "Organotransition Metal Chemistry". A. F. HILL. Royal Society of Chemistry. 2009.
- 3.- *Química Organometálica de los Metales de Transición*. R. H. CRABTREE y E. P. FAJARNÉS: Universitat Jaume I, Castellón, 1997.

- 2:** BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- 1.- Curso de iniciación a la Química Organometálica, G. A. CARRIEDO, D. M. SAN JOSÉ: Servicio de Publicaciones. Universidad de Oviedo. 2004.
- 2.- *Organometallic Chemistry*. G. O. SPESSARD y G. L. MIESSLER: Prentice Hall, 1997.
- 3.- *Organometallic Chemistry of the Transition Elements*. F. P. PRUCHNIK: Ed. Plenum Press, 1990.
- 4.- *Organometallics 1. Complexes with Transition Metal - Carbon s-Bonds. Organometallics 2. Complexes with Transition Metal - Carbon p-Bonds*. M. BOCHMANN: Oxford Science Publications, 1994

- 3:** SITIOS WEB

1. <http://www.ilpi.com/organomet/>

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Bochmann, Manfred. *Organometallics. 1, Complexes with transition metal- carbon [s]-bonds* / Manfred Bochmann . - [1st ed. repr.] Oxford [etc.] : Oxford University Press, 2000
- Bochmann, Manfred. *Organometallics. 2, Complexes with transition metal- carbon [p]-bonds* / Manfred Bochmann . - 1st ed. repr. Oxford [etc.] : Oxford University Press, 2000
- 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
- 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
- Elschenbroich, Christoph. *Organometallics : a concise introduction* / Christoph Elschenbroich, Albrecht Salzer . - 2nd ed., rev. Weinheim [etc.] : VCH, 1992
- Hill, Anthony F.. *Organotransition metal chemistry* / Anthony F. Hill Cambridge: Royal Society of Chemistry, cop. 2002

- 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
- Spessard, Gary O.. Organometallic chemistry / Gary O. Spessard, Gary L. Miessler New Jersey : Prentice-Hall, cop.1997