

Grado en Química

27234 - Química organometálica

Guía docente para el curso 2015 - 2016

Curso: , Semestre: , Créditos: 5.0

Información básica

Profesores

- **Miguel Baya García** mbaya@unizar.es
- **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 la página web de la Facultad de Ciencias.

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](#) 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 3^a 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 s 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 alquinilos 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. Alquino 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(arenos)metal complejos. Compuestos semi-sandwich arenos 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>

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.

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
- Carriero Ule, Gabino A.. Curso de iniciación a la química organometálica / Gabino A. Carriero Ule, Daniel Miguel San José . - [1^a 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