COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS Y APLICACIÓN EN CATÁLISIS
GUÍA DOCENTE CURSO 2019-20

Titulación:	Grado en Química				**702G**
Asignatura:	Compuestos organometálicos y aplicación en catálisis				**530**
Materia:	Química avanzada				
Módulo:	Química Avanzada				
Modalidad de enseñanza de la titulación:	Presencial	**Carácter:**	Optativa		
Curso:	4	**Créditos ECTS:**	6,00	**Duración:**	Semestral (Primer Semestre)
Horas presenciales:	60,00			**Horas estimadas de trabajo autónomo:**	90,00

Idiomas en que se imparte la asignatura:	Español
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Inglés, Español

DEPARTAMENTOS RESPONSABLES DE LA DOCENCIA

QUÍMICA					**R112**
Dirección:	C/ Madre de Dios, 53			**Código postal:**	26006
Localidad:	Logroño			**Provincia:**	La Rioja
Teléfono:	941299620	**Fax:**	941299621	**Correo electrónico:**	dpto.dq@unirioja.es

PROFESORADO PREVISTO

Profesor:	Berenguer Marín, Jesús Rubén				**Responsable de la asignatura**
Teléfono:	941299646	**Correo electrónico:**	jesus.berenguer@unirioja.es		
Despacho:	1210	**Edificio:**	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO	**Tutorías:**	Consultar

Profesor:	Olmos Pérez, María Elena				
Teléfono:	941299648	**Correo electrónico:**	m-elena.olmos@unirioja.es		
Despacho:	1212	**Edificio:**	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO	**Tutorías:**	Consultar

DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

- Desarrollo histórico y clasificación de los compuestos organometálicos.
- Compuestos organometálicos de los elementos de los grupos s y p.
- Compuestos organometálicos de los elementos de elementos de transición.
- Introducción a la catálisis homogénea.
- Transformación de olefinas.
- Otros procesos catalíticos.

REQUISITOS PREVIOS DE CONOCIMIENTOS Y COMPETENCIAS PARA PODER CURSAR CON ÉXITO LA ASIGNATURA

Recomendados para poder superar la asignatura.

No se requieren

CONTEXTO

El objetivo principal de esta asignatura consiste en el estudio y comprensión de las distintas situaciones de enlace y reactividad de los principales tipos de compuestos organometálicos, así como de su relación con distintos tipos de procesos catalíticos, muchos de los cuales conforman un área fundamental de la Química y la Industria.

COMPETENCIAS

Competencias generales

- CGIT01: Ser capaz de analizar y sintetizar información.
- CGIT03: Comunicar información de manera oral y escrita.
- CGIT04: Comprender textos escritos en una segunda lengua relacionados con la propia especialidad.
- CGIT05. Usar las tecnologías de información y comunicación.
- CGIT06: Resolver problemas.
- CGIP03: Adquirir y aplicar el compromiso ético.
- CGIP04: Razonar de manera crítica.

- CGS01: Mostrar sensibilidad en temas medioambientales y sostenibilidad.
- CGS02: Realizar un aprendizaje autónomo.

Competencias específicas

- CE02. Describir la variabilidad de las propiedades más características de los elementos químicos según la Tabla Periódica.
- CE04. Identificar los principales tipos de reacciones químicas y sus características.
- CE07. Identificar los elementos químicos y sus compuestos. Describir su obtención, estructura y reactividad.
- CE08. Identificar las propiedades de los compuestos orgánicos, inorgánicos y órganometálicos y conocer su reactividad.
- CE16. Demostrar el conocimiento y la comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- CE17. Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- CE18. Reconocer y analizar nuevos problemas y plantear estrategias para solucionarlos.
- CE19. Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.
- CE27: Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
- CE28: Relacionar la Química con otras disciplinas.
-QA2: Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.

RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

- Conocer los distintos tipos de compuestos organometálicos y predecir su estabilidad y reactividad.
- Conocer y relacionar la estructura de los compuestos organometálicos con sus propiedades, reactividad y posibles aplicaciones en catálisis homogénea.
- Contrastar la gran diferencia de reactividad que existe entre compuestos organometálicos de elementos de los bloques s y p y los organoderivados de metales de transición.
- Conocer las reacciones básicas de los compuestos de coordinación y organometálicos, así como su implicación en los diferentes ciclos catalíticos; comprendiendo la importancia que dichos derivados poseen para industrias tales como la farmaceútica.
- Conocer las características generales de un proceso de catálisis homogénea y saber distinguirlo de un proceso de catálisis heterogénea.
- Comprender cómo los diferentes tipos de catálisis homogénea conducen a la obtención de procesos químicos más eficientes y ecológicos.
- Desarrollar en los estudiantes las habilidades para aplicar sus conocimientos químicos en la elaboración de informes, así como en la defensa de argumentos frente a un público especializado.

TEMARIO

1 DESARROLLO HISTÓRICO Y CLASIFICACIÓN
- Introducción y desarrollo histórico. Tendencias actuales.
- Demarcación y clasificación de los compuestos organometálicos.
- Clasificación de ligandos en Química Organometálica.
- Regla de los 18 EV.

2 COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS DE LOS ELEMENTOS s Y p
- Clasificación en función del enlace.
- Propiedades termodinámicas y cinéticas.
- Obtención y reactividad.
- Algunas consideraciones estructurales de complejos de Li, Mg, B y Al.
- Compuestos organosilíceos: Siliconas.

3 COMPUESTOS DE ALQUILO Y ARILO DE METALES DE TRANSICIÓN
- Propiedades termodinámicas y cinéticas.
- Obtención y reactividad.
- Otros ligandos con enlace s: alquenilo, alquinilo, ligandos perhalogenados.

4 CARBONILOS METÁLICOS
- Síntesis.
- Modos de coordinación y enlace en carbonilos metálicos.
- Reactividad.
- Carbonil metalatos.
- Comparación con los derivados de isocianuro.

5 ALQUILIDENO Y ALQUILIDINO COMPLEJOS
- Síntesis.
- Estructura y enlace.
- Reactividad.

6 COMPUESTOS CON OLEFINAS
- Síntesis.

- Enlace metal-olefina. Consecuencias estructurales y espectroscópicas.
- Diolefinas: enlace en complejos metal-butadieno..
- Reactividad.

7 ESTUDIO ESTRUCTURAL DE OTROS SISTEMAS CON ENLACES DE TIPO p

- Alquinos.
- Alilos y polienilos.
- Sistemas p-cíclicos de tres y cuatro átomos de carbono.

8 COMPLEJOS CON LIGANDOS CICLOPENTADIENILOS Y ARENOS

- Metalocenos lineales y plegados.
- Estructura, reactividad y propiedades.

9 GENERALIZACIÓN DE LA REACTIVIDAD DE SISTEMAS DE TIPO p FRENTE A NUCLEÓFILOS.

- Regla de Davies-Green-Mingos.

10 INTRODUCCIÓN A LA CATÁLISIS HOMOGÉNEA

- Comparación con la catálisis heterogénea.
- Formación de especies activas y vacantes coordinativas.
- Ligandos auxiliares: Efectos electrónicos y estéricos.

11 HIDROGENACIÓN DE OLEFINAS

- Hidrogenación de olefinas. Ruptura heterolítica. Ruptura homolítica sobre dos centros metálicos. Ruptura homolítica por adición oxidante.
- Catalizador de Wilkinson.
- Hidrogenación asimétrica de olefinas.

12 TRANSFORMACIÓN DE OLEFINAS

- Dimerización y polimeración de olefinas. Proceso SHOP.
- Metátesis de compuestos insaturados.
- Isomerización de olefinas.

13 PROCESOS CON LA PARTICIPACIÓN DE MONÓXIDO DE CARBONO

- Síntesis de ácido acético: Procesos BASF y Monsanto.
- Hidroformilación de olefinas: Proceso oxo.
- Reacciones de carbonilación.
- La reacción de Fischer-Tropsch.

14 OXIDACIÓN DE HIDROCARBUROS

- Síntesis de acetaldehído: Proceso Wacker.
- Epoxidación de olefinas.
- Otras reacciones de oxidación.

15 OTROS PROCESOS CATALÍTICOS DE INTERÉS

- Reacciones de formación de enlace carbono-carbono: Heck, Sonogashira, Suzuki, Stille…
- Catálisis enzimática.
- Catálisis asimétrica.
- Catalizadores soportados.

BIBLIOGRAFÍA

Tipo:	Título
Básica	Organometallics Absys
Básica	Química organometálica de los metales de transición Absys
Básica	The organometallic chemistry of the transition metals Absys
Básica	Química organometálica Absys
Básica	Curso de iniciación a la química organometálica Absys
Complementaria	Homogeneous catalysis : the applications and chemistry of catalysis by soluble transition metal complexes Absys
Complementaria	Fundamentals of organometallic catalysis Absys

Recursos en Internet
Portal de las publicaciones de la American Chemical Society http://pubs.acs.org/
Portal de las publicaciones de la Royal Society of Chemistry http://pubs.rsc.org/en/Journals
Portal de la editorial Wiley-VCH http://www.wiley-vch.de/publish/en
Portal de la editorial Springer

http://www.springer.com/
Portal de la editorial Elsevier http://www.elsevier.com/
Portal de búsqueda de Scopus http://www.scopus.com/home.url

METODOLOGÍA

Modalidades organizativas

Clases teóricas
Seminarios y talleres
Clases prácticas
Estudio y trabajo en grupo
Estudio y trabajo autónomo individual

Métodos de enseñanza

Método expositivo - Lección magistral
Estudio de casos
Resolución de ejercicios y problemas

ORGANIZACIÓN

Actividades presenciales	Tamaño de grupo	Horas
Clases teóricas	Grande	60,00
Total de horas presenciales		60,00

Trabajo autónomo del estudiante	Horas
Estudio autónomo individual o en grupo	40,00
Resolución individual de ejercicios, cuestiones u otros trabajos, actividades en biblioteca o similar	30,00
Tareas propuestas por el profesor	20,00
Total de horas de trabajo autónomo	90,00

Total de horas	150,00

EVALUACIÓN

Sistemas de evaluación	Recuperable	No Recup.
Pruebas escritas	70%	
Técnicas de observación		10%
Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	20%	
Total	100%	

Comentarios

Se realizará un examen parcial que liberará materia (35%) si se supera un 5 sobre 10 en el mismo. Esta nota sólo se guardará para la primera convocatoria.
El material didáctico se encontrará disponible en el aula virtual para todos los alumnos matriculados en esta asignatura
Para los estudiantes a tiempo parcial (reconocidos como tales por la Universidad), las actividades de evaluación no recuperable podrán ser sustituidas por otras, a especificar en cada caso. Esta posibilidad se habilitará siempre y cuando la causa que le impida la realización de la actividad de evaluación programada sea la que ha llevado al reconocimiento de la dedicación a tiempo parcial.

Criterios críticos para superar la asignatura

La nota de la asignatura se obtiene como suma de los diferentes porcentages, siempre y cuando, el alumno consiga al menos un 40% del valor total estipulado para las pruebas escritas.