



## 1. DATOS GENERALES

**Asignatura:** REACTIVIDAD DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN Y ORGANOMETÁLICOS

**Código:** 310581

**Tipología:** OBLIGATORIA

**Créditos ECTS:** 6

**Grado:** 2326 - MASTER UNIVERSITARIO EN INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA

**Curso académico:** 2019-20

**Centro:** 1 - FTAD. CC. Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS CR.

**Grupo(s):** 20

**Curso:** 1

**Duración:** Primer cuatrimestre

**Lengua principal de impartición:** Español

**Segunda lengua:** Inglés

**Uso docente de otras lenguas:**

**English Friendly:** N

**Página web:**

**Bilingüe:** N

**Profesor:** FERNANDO CARRILLO HERMOSILLA - Grupo(s): 20

| Edificio/Despacho | Departamento                  | Teléfono | Correo electrónico        | Horario de tutoría                         |
|-------------------|-------------------------------|----------|---------------------------|--------------------------------------------|
| SAN ALBERTO MAGNO | QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ. | 3417     | fernando.carrillo@uclm.es | Lunes, Martes y Miércoles de 18:00 a 19:00 |

**Profesor:** FELIX ANGEL JALON SOTES - Grupo(s): 20

| Edificio/Despacho                | Departamento                  | Teléfono  | Correo electrónico  | Horario de tutoría                         |
|----------------------------------|-------------------------------|-----------|---------------------|--------------------------------------------|
| San Alberto Magno/Planta primera | QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ. | 926052184 | felix.jalon@uclm.es | Lunes, Martes y Miércoles de 16:00 a 18:00 |

## 2. REQUISITOS PREVIOS

Los de admisión al Máster

## 3. JUSTIFICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS, RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS Y CON LA PROFESIÓN

La asignatura de reactividad de compuestos de coordinación y organometálicos corresponde a la materia de Química Inorgánica Avanzada, incluida en el módulo de conocimientos avanzados en química, se imparte en el primer semestre del Master de Investigación en Química de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la UCLM.

En esta asignatura se adquirirán conocimientos sobre los compuestos organometálicos con enlaces sigma metal-carbono; en concreto, se estudiará la síntesis, estructura y reactividad de compuestos alquilo, arilo, alquenoilo y alquinoilo metálicos. Así mismo, se considerarán los compuestos organometálicos con enlaces múltiples metal-carbono: carbenos y carbinos, y los compuestos organometálicos con ligandos insaturados: la síntesis, estructura y reactividad de compuestos con ligandos olefina, alquino, alilo, ciclopentadienilo y areno.

Se adquirirán conocimientos avanzados en Química de la Coordinación y en relación con su reactividad, como son los de estudio de procesos y mecanismos de reacción de sustitución, de isomerización, de transformación de los ligandos y de transferencia electrónica, química receptor-sustrato y catálisis supramolecular. Así mismo se adquirirán conocimientos sobre la aplicación de diversas técnicas estructurales y métodos para el estudio de la reactividad de estos compuestos moleculares.

## 4. COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN QUE LA ASIGNATURA CONTRIBUYE A ALCANZAR

**Competencias propias de la asignatura**

| Código | Descripción                                                                                                                                                                                                                                                 |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| E02    | Relacionar las propiedades macroscópicas y supramoleculares con las de átomos, moléculas y compuestos químicos no moleculares.                                                                                                                              |
| E06    | Conocer los principales conceptos y aplicaciones de Química de la coordinación y organometálica.                                                                                                                                                            |
| E11    | Conocer las principales áreas y temas de investigación y las metodologías sostenibles en Química.                                                                                                                                                           |
| G01    | Conocer la precisión de los datos experimentales y su utilización para la planificación del trabajo experimental de investigación.                                                                                                                          |
| T02    | Capacidad para trabajar en equipo y, ejercer funciones de liderazgo, fomentando el carácter emprendedor                                                                                                                                                     |
| T05    | Capacidad de obtener información bibliográfica a nivel de investigación, incluyendo recursos en Internet (bases de datos, bibliografía científica especializada, redes sociales, etc...), así como llevar a cabo una selección y clasificación de la misma. |
| T06    | Tener aptitud para desarrollarse profesionalmente mediante la formación continua.                                                                                                                                                                           |

## 5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS

**Resultados de aprendizaje propios de la asignatura****Descripción**

Conocer los principales conceptos de Química Supramolecular y en particular las principales vías de diseñar un sistema receptor-sustrato, de estimular su reactividad y de controlar su selectividad hacia procesos de catálisis supramolecular

Conocer los principales tipos de mecanismos de sustitución, isomerización, transformación de ligandos y de transferencia electrónica en compuestos complejos

Conocer en profundidad los conceptos de química organometálica. Conocer la preparación de compuestos organometálicos, su reactividad y su aplicación en síntesis orgánica y en el diseño de catalizadores homogéneos.

## 6. TEMARIO

**Tema 1: Reactividad de compuestos organometálicos**

**Tema 1.1** Compuestos organometálicos con ligandos dadores sigma. Características generales. Métodos de síntesis de derivados alquilo y arilo

metálicos.

**Tema 1.2** Enlace y estructura en derivados alquilo y arilo metálicos. Reactividad de los derivados con enlace sigma metal-carbono. Compuesto metal-alquenoilo, metal-alquinoilo, metal-acilo.

**Tema 1.3** Compuestos con enlaces múltiples metal-carbono. Complejos con ligandos carbeno (alquilideno): tipo Fischer y tipo Schrock. Estructura y enlace. Métodos de síntesis. Reactividad. Complejos con ligandos carbino (alquidino): tipo Fischer y tipo Schrock. Estructura y enlace. Métodos de síntesis. Reactividad.

**Tema 1.4** Compuestos organometálicos con ligandos alilo. Estructura y modelo de enlace. Métodos de síntesis. Reactividad y aplicaciones. Compuestos organometálicos con ligandos ciclopentadienilo. Metalocenos; estructura, modelo de enlace y reactividad. Metalocenos angulares; estructura, modelo de enlace, síntesis y reactividad. Derivados monociclopentadienilo; estructura, modelo de enlace, síntesis y reactividad.

**Tema 1.5** Compuestos con ligandos insaturados. Compuestos con ligandos olefina. Estructura y enlace. Métodos de síntesis. Reactividad. Compuestos con ligandos acetileno. Estructura y enlace. Métodos de síntesis. Reactividad.

## Tema 2: Reactividad de compuestos de coordinación

**Tema 2.1** Mecanismos de reacción en química de la coordinación. Reacciones de primer y de segundo orden. Parámetros de activación y perfil de la reacción. Métodos experimentales para la determinación de constantes de velocidad y parámetros de activación.

**Tema 2.2** Mecanismos de reacción en química de la coordinación. Reacciones de sustitución en complejos planos cuadrados y en complejos octaédricos.

**Tema 2.3** Mecanismos de reacción en química de la coordinación. Reacciones de isomerización en complejos con números de coordinación 4, 5 y 6.

**Tema 2.4** Mecanismos de reacción en química de la coordinación. Reacciones redox. Mecanismos de esfera externa y de esfera interna.

**Tema 2.5** Química receptor-sustrato y catálisis supramolecular.

## COMENTARIOS ADICIONALES SOBRE EL TEMARIO

## 7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA

| Actividad formativa                           | Metodología                         | Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021) | ECTS                                    | Horas | Ev | Ob | Rec | Descripción |
|-----------------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|-------|----|----|-----|-------------|
| Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]    | Método expositivo/Lección magistral | E02 E06 E11 G01 T05 T06                                           | 1.3                                     | 32.5  | N  | -  | -   |             |
| Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL]  | Trabajo dirigido o tutorizado       | E02 E06 E11 G01 T02 T05 T06                                       | 0.3                                     | 7.5   | S  | N  | S   |             |
| Foros y debates en clase [PRESENCIAL]         | Tutorías grupales                   | E02 E06 E11 G01 T02 T05 T06                                       | 0.2                                     | 5     | N  | -  | -   |             |
| Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA] | Trabajo autónomo                    | E02 E06 E11 G01 T02 T05 T06                                       | 3.42                                    | 85.5  | S  | S  | S   |             |
| Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]   | Autoaprendizaje                     | E02 E06 E11 G01 T05 T06                                           | 0.7                                     | 17.5  | N  | -  | -   |             |
| Prueba final [PRESENCIAL]                     | Autoaprendizaje                     | E02 E06 E11 G01 T05 T06                                           | 0.08                                    | 2     | S  | S  | S   |             |
| Total:                                        |                                     |                                                                   | 6                                       | 150   |    |    |     |             |
| Créditos totales de trabajo presencial: 1.88  |                                     |                                                                   | Horas totales de trabajo presencial: 47 |       |    |    |     |             |
| Créditos totales de trabajo autónomo: 4.12    |                                     |                                                                   | Horas totales de trabajo autónomo: 103  |       |    |    |     |             |

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria

Rec: Actividad formativa recuperable

## 8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES

| Sistema de evaluación            | Valoraciones          |                  | Descripción |
|----------------------------------|-----------------------|------------------|-------------|
|                                  | Estudiante presencial | Estud. semipres. |             |
| Resolución de problemas o casos  | 20.00%                | 0.00%            |             |
| Elaboración de trabajos teóricos | 40.00%                | 0.00%            |             |
| Prueba final                     | 40.00%                | 0.00%            |             |
| Total:                           | 100.00%               | 0.00%            |             |

### Particularidades de la convocatoria extraordinaria:

En esta convocatoria se conservará la calificación adquirida en aquellas pruebas que hayan superado el 5 (sobre 10) durante el mismo curso académico.

## 9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL

| No asignables a temas                                                           |              |
|---------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| Horas                                                                           | Suma horas   |
| <b>Tema 1 (de 2): Reactividad de compuestos organometálicos</b>                 |              |
| <b>Actividades formativas</b>                                                   | <b>Horas</b> |
| Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral] | 16.25        |
| Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]     | 3.75         |
| Foros y debates en clase [PRESENCIAL][Tutorías grupales]                        | 2.5          |
| Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]                 | 42.75        |
| Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Autoaprendizaje]                    | 8.75         |
| Prueba final [PRESENCIAL][Autoaprendizaje]                                      | 1            |
| <b>Tema 2 (de 2): Reactividad de compuestos de coordinación</b>                 |              |
| <b>Actividades formativas</b>                                                   | <b>Horas</b> |
| Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral] | 16.25        |
| Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]     | 3.75         |
| Foros y debates en clase [PRESENCIAL][Tutorías grupales]                        | 2.5          |

|                                                                                 |                   |
|---------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]                 | 42.75             |
| Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Autoaprendizaje]                    | 8.75              |
| Prueba final [PRESENCIAL][Autoaprendizaje]                                      | 1                 |
| <b>Actividad global</b>                                                         |                   |
| <b>Actividades formativas</b>                                                   | <b>Suma horas</b> |
| Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Trabajo dirigido o tutorizado]     | 7.5               |
| Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral] | 32.5              |
| Foros y debates en clase [PRESENCIAL][Tutorías grupales]                        | 5                 |
| Elaboración de informes o trabajos [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]                 | 85.5              |
| Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Autoaprendizaje]                    | 17.5              |
| Prueba final [PRESENCIAL][Autoaprendizaje]                                      | 2                 |
| <b>Total horas: 150</b>                                                         |                   |

| 10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS                                |                                                                                                                     |                                              |                       |                   |      |                              |
|-----------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------|-----------------------|-------------------|------|------------------------------|
| Autor/es                                                  | Título/Enlace Web                                                                                                   | Editorial                                    | Población             | ISBN              | Año  | Descripción                  |
| C. ELSCHENBROICH, A. SALZER                               | Organometallics                                                                                                     | VCH                                          | Weinheim              | 3-527-28164-9     | 1992 | Libro de consulta importante |
| D. ASTRUC                                                 | Química Organometálica                                                                                              | Reverté                                      | Barcelona             | 84-291-7007-3     | 2003 | Libro de consulta general    |
| E. C. Constable                                           | Metals and ligand reactivity                                                                                        | Ellis Horwood, cop.                          | New York              | 0-13-577222-2     | 1990 | Libro de consulta específico |
| Geoffrey Wilkinson , Robert D. Gillard, Jon A. McCleverty | COMPREHENSIVE coordination chemistry : the synthesis, reaction, properties & applications of coordination compounds | Pergamon Press                               | Oxford                | 0-08-026232-5     | 1987 | Libro de consulta general    |
| J. HARTWIG                                                | Organotransition Metal Chemistry                                                                                    | University Science Books                     | Sausalito, CA         | 978-1-891389-53-5 | 2010 | Libro de consulta general    |
| J. P. COLLMAN, L. S. HEGEDUS, J. R. NORTON, R. G. FINKE   | Principles and Applications of Organotransition Metal Chemistry                                                     | University Science Books                     | Mill Valley, CA       | 0-935702-51-2     | 1987 | Libro de consulta general    |
| Joan Ribas Gispert                                        | Coordination Chemistry                                                                                              | Wiley-VCH                                    | Weinheim              | 978-3-527-31802-5 | 2008 | libro de consulta importante |
| Joan Ribas Gispert                                        | Química de Coordinación                                                                                             | Ediciones Omega                              | Barcelona             | 84-282-1210-4     | 2000 | Libro de consulta importante |
| M. BOCHMANN                                               | Organometallics, Vol. 1 y 2                                                                                         | Oxford University Press                      | Oxford                | 0-19-855750-7     | 2003 | Libro de consulta general    |
| P.K. Purcell, J.C. Kotz                                   | Química Inorgánica                                                                                                  | Reverté SA                                   |                       |                   | 1979 | Libro de consulta específico |
| R. H. CRABTREE                                            | The Organometallic Chemistry of the Transition Metals                                                               | John Wiley and Sons                          | Nueva York            | 0-471-18423-3     | 2001 | Libro de consulta general    |
| Robert H. Crabtree, Eduardo V. Peris Fajarnés             | Química organometálica de los metales de transición                                                                 | Publicacions de la Universitat Jaume I, D.L. | Castellón de la Plana | 84-8021-134-2     | 1997 | Libro de consulta general    |
| S. R. Logan                                               | Fundamentos de cinética química                                                                                     | Addison Wesley                               | Madrid                | 84-7829-030-3     | 2001 | Libro de consulta específico |