



GUÍA DOCENTE 2023-2024

**Síntesis, modelización y propiedades de complejos
organometálicos**

1. Denominación de la asignatura:

SÍNTESIS, MODELIZACIÓN Y PROPIEDADES DE COMPLEJOS
ORGANOMETÁLICOS

Titulación

Máster Universitario en Química Avanzada

Código

7795

2. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Química

**3.a Profesor/a que imparte la docencia (Si fuese impartida por más de uno/a
incluir todos/as) :**

Santiago Aparicio Martínez, Francisco Javier Hoyuelos Alvaro, Gustavo Espino
Ordoñez, Saturnino Ibeas Cortés

3.b Coordinador/a de la asignatura

Saturnino Ibeas Cortés

4. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

2 semestre

5. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Optativa



6. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

No se han establecido requisitos previos.

7. Número de créditos ECTS de la asignatura:

5

8. Competencias que debe adquirir el/la estudiante al cursar la asignatura

CG2 - Tener conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio incluyendo las habilidades básicas en Tecnologías de la Información y Comunicación.

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB9.- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10.- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CE1 - Haber adquirido conocimientos avanzados de Química demostrando, en un contexto altamente especializado, una comprensión detallada y fundamentada de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en Química.

CE2.- Poseer la capacidad de llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio analíticos, sintéticos y de caracterización de compuestos, manipulando con seguridad reactivos e instrumentación química, teniendo en cuenta riesgos en el uso de las sustancias químicas y los procedimientos de laboratorio.

CE5 - Tener la capacidad para proyectar y optimizar experimentos, disminuyendo costes y tiempo, manteniendo la calidad de la información, el respeto al medio ambiente y a las normativas de calidad y seguridad.

CE8 - Saber aplicar los conocimientos de los procesos químicos tanto en las actividades industriales, como en el laboratorio a problemas nuevos de carácter multidisciplinar.

En la página web del Título se encuentra disponible la vinculación entre los objetivos ODS y las competencias del Título: <https://www.ubu.es/master-universitario-en-quimica-avanzada/informacion-basica/objetivos-y-competencias>



9. Programa de la asignatura

9.1- Objetivos docentes
- Síntesis de complejos organometálicos: métodos y caracterización. - Métodos computacionales y modelado molecular en complejos organometálicos. - Determinación experimental: estabilidad, estudio ácido-base y comportamiento espectroscópico.
9.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Síntesis de complejos organometálicos Drogas metalo-terapéuticas y compuestos metálicos en diagnóstico - Complejos Metálicos y Organometálicos como drogas y agentes anticancerígenos. Compuestos de platino, rutenio, iridio, titanio, oro y cobre. - Complejos Metálicos como inhibidores de enzimas y Catalizadores en células vivas - Complejos metálicos como agentes fluorescentes en técnicas de visualización celular Complejos organometálicos en reacciones fotocatalíticas - Reacciones fotocatalíticas en Química Orgánica - Complejos de Metales de Transición en Fotocatálisis - Preparación de Complejos fotosensible y su uso en fotocatálisis Prácticas de laboratorio Síntesis y caracterización de complejos organometálicos de Ru(II) o Ir(III) con propiedades fotofísicas. Evaluación de su actividad fotocatalítica Modelización molecular de compuestos organometálicos Sesiones Teóricas - Fundamentos de modelización molecular. - Mecánica molecular. - Métodos mecanocuánticos. Teoría del Funcional de la densidad (DFT). DFT para compuestos organometálicos. - Dinámica molecular clásica. Modelización de compuestos organometálicos en disolución - Desarrollo de campos de fuerzas para compuestos organometálicos. - Minimización de la energía. - Aspectos estructurales. - Visualización molecular. - Software. Sesiones Prácticas - Fundamentos de Linux para el desarrollo de modelización molecular en supercomputadores. - Computación: preparación de inputs y análisis de outputs. - Ejercicios de visualización molecular. - Ejercicios de minimización y optimización de estructuras seleccionadas de compuestos organometálicos utilizando aproximaciones tipo DFT. - Ejercicios de preparación/parametrización de campos de fuerzas y su aplicabilidad en



simulaciones de dinámica molecular clásica.

Estudio experimental de sus propiedades

Propiedades solvatocrómicas

Influencia de la polaridad del disolvente y mezclas de éstos sobre los espectros de UV-Vis y Fluorescencia.

Propiedades ácido-base

Estudio del comportamiento ácido-base y determinación de las constantes de acidez.

Espectros de emisión

Estudio de los espectros de emisión por fluorescencia. Determinación de la constante de desactivación bimolecular.

Interacción con otros reactivos

Estudio cinético y termodinámicos de reacciones con reactivos de interés mediante diferentes técnicas (calorimetría, T-Jump, Stopped-Flow, etc.)

9.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Atkins, P. W., Physical chemistry for the life sciences , 2006, Oxford University Press,
Comba, P.; Hambley, T. W.; Martin, B., (2009) Molecular Modelling of Inorganic Compounds, 3rd Ed. , Wiley-VCH,
Cundari, (2001) T. R. Computational Organometallic Chemistry, Ed. CRC Press,
Gérard Jaouen, (2006) Bioorganometallics: Biomolecules, Labelling, Medicine., Wiley-VCH.,
Gilles Gasser, (2014) Inorganic Chemical Biology: Principles, Techniques and Applications., Wiley,
Hinchliffe, (2003) A. Molecular Modelling for Beginners, Ed. John Wiley and Sons,
James C. Dabrowiak., (2009) Metals in Medicine., Wiley. ,
MacGregor, S. A.; Eisenstein, O., (2016) Computational Studies in Organometallic Chemistry, Ed. Springer,
Marcel Gielen and Edward R. T. Tiekink., (2005) Metallotherapeutic Drugs and Metal-based Diagnostic Agents: The use of Metals in Medicine., Wiley. ,
Marcus, Yizhak, The properties of solvents, 1998, John Wiley & Sons,
Stephen E. Harding and Babur Z. Chowdhry, Protein-ligand interactions : structure and spectroscopy, 2008, Oxford University Press,
Wiest, O.; Wu, Yundong, W., (2012) Computational Organometallic Chemistry, Ed. Springer,



9.4- Acceso a la Bibliografía Recomendada desde Leganto

https://leganto.ubu.es/leganto/public/34BUC_UBU/lists?courseCode=7795&auth=SAML

10. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el/la estudiante:

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases teóricas y seminarios	CB10	5	20	25
Prácticas de laboratorio y sala de ordenadores	CE1, CE2, CE5, CE8	39	41	80
Resolución de cuestionarios	CB6, CB7	0	5	5
Presentación y defensa de trabajos	CG6, CB9	1	14	15
Total		45	80	125

11. Sistemas de evaluación:

El sistema de evaluación para estudiantes de intercambio deberá ser modificado en el supuesto de que los calendarios académicos de las universidades de origen y de destino no sean coincidente.

El alumno debe obtener como mínimo un 3 sobre 10 en cada una de los procedimientos de evaluación para realizar la media aritmética ponderada. Para superar la asignatura, se debe asistir como mínimo al 80% de las prácticas y la nota media aritmética ponderada debe de ser igual o superior a 5 sobre 10. Todos los procedimientos son recuperables en la segunda convocatoria.

Los alumnos están obligados a observar las reglas básicas sobre autenticidad y autoría en la realización de cualquier prueba de evaluación ya sea presencial o no. La realización fraudulenta de alguna prueba o de los trabajos exigidos en la evaluación de alguna asignatura comportará una calificación de cero en la asignatura correspondiente al curso académico en el que se produzca el fraude.

El profesor podrá utilizar cualquier herramienta antiplagio que la Universidad ponga a su disposición para asegurar que no ha habido copia o plagio en ninguna de las pruebas de evaluación realizadas por los estudiantes. Si el estudiante no autorizara su uso no podrá ser evaluado de ese procedimiento y se le calificará con un cero.



Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Presentación y defensa del trabajo realizado en el laboratorio	40 %	40 %
Trabajo en el laboratorio	30 %	30 %
Presentación de una memoria	30 %	30 %
Total	100 %	100 %

Evaluación excepcional:

Para poder optar a esta evaluación, se deberá asistir al menos al 50% de las prácticas. La evaluación en este caso será 40% un examen, 30% una memoria y 30% cuestionarios.

12. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

Se realizarán a través de la plataforma UBUvirtual

13. Calendarios y horarios:

Tanto el calendario académico como los horarios se encuentran publicados en la página WEB del máster.

14. Idioma en que se imparte:

Español