

Información del Plan Docente

Año académico	2017/18
Centro académico	100 - Facultad de Ciencias
Titulación	543 - Máster Universitario en Química Molecular y Catálisis Homogénea
Créditos	6.0
Curso	1
Periodo de impartición	Primer Semestre
Clase de asignatura	Obligatoria
Módulo	---

1. Información Básica

1.1. Introducción

La asignatura se centra en el estudio de los conceptos básicos de catálisis, los diferentes tipos de catalizadores, el mecanismo de acción y sus aplicaciones. La asignatura está dividida en varios bloques diferenciados en los que se abordan: i) conceptos básicos de catálisis, ii) fundamentos de catálisis organometálica, iii) aplicaciones y mecanismos de catalizadores organometálicos, iv) los principios, clasificación y aplicaciones de catalizadores heterogéneos, y v) el diseño y mecanismo de acción de organocatalizadores. Por último, a lo largo del curso se presenta una selección de algunas de las líneas de investigación de vanguardia en catálisis y su potencial para afrontar los nuevos retos para un desarrollo sostenible.

1.2. Recomendaciones para cursar la asignatura

Se recomienda el dominio de los conceptos básicos de enlace, estructura y reactividad de compuestos orgánicos e inorgánicos. La asistencia a clase y el trabajo continuado facilita la superación de la asignatura.

1.3. Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura de Catálisis se enmarca dentro de Módulo obligatorio *Química Molecular y Catálisis*. Es una asignatura de carácter obligatorio que se imparte durante el primer semestre del curso y tiene una carga lectiva de 6 créditos ECTS. La asignatura proporciona una formación avanzada que permite comprender los principios básicos en el diseño de catalizadores para transformaciones sintéticas de un modo eficiente y selectivo. El desarrollo y optimización de catalizadores es uno de los objetivos prioritarios de muchos de los grupos de investigación del ISQCH, y por lo tanto, se trata de una asignatura fundamental que debe posibilitar la realización de Trabajos fin de Máster en esta temática de investigación.

1.4. Actividades y fechas clave de la asignatura

La asignatura Catálisis se cursará durante el primer semestre, al igual que otras asignaturas obligatorias del Máster y las optativas Metodologías fundamentales de síntesis y Recursos bibliográficos y bases de datos. A lo largo del curso se realizarán diversos controles y un trabajo individual o en grupo basado en un artículo científico. Las fechas de realización y presentación de los mismos se comunicarán con la suficiente antelación.

Las prácticas de la asignatura *Catálisis*, junto a las de otras asignaturas del Módulo *Química Molecular y Catálisis*,

60452 - Catálisis

constituyen un bloque integrado. Las sesiones de laboratorio se realizarán en la segunda parte del cuatrimestre en horario y lugar que se anunciarán con la suficiente antelación.

2.Resultados de aprendizaje

2.1.Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

Identificar la importancia de la catálisis en el desarrollo de procesos y productos químicos de modo sostenible.

Conocer los diferentes tipos de catalizadores, su modo de acción, ventajas e inconvenientes, así como sus principales aplicaciones.

Evaluar la actividad, selectividad e impacto ambiental de los procesos catalíticos.

Identificar las reacciones fundamentales en catálisis organometálica.

Conocer las principales reacciones homogéneas catalizadas por complejos de metales de transición y sus mecanismos de reacción.

Describir los diferentes tipos de catalizadores heterogéneos así como las diferentes estrategias de inmovilización de catalizadores moleculares.

Describir los diferentes tipos de reacciones organocatalizadas y sus aplicaciones.

Identificar las líneas de investigación actuales en catálisis y su contribución al desarrollo científico y tecnológico.

2.2.Importancia de los resultados de aprendizaje

Los conocimientos adquiridos en la asignatura deben proporcionar al alumno una visión global de la importancia de la investigación en catálisis, las principales líneas de investigación y la contextualización de las mismas dentro del panorama general de los procesos catalíticos. El diseño de catalizadores, su evaluación y optimización, son claves en el desarrollo de procesos químicos sostenibles ya que permite la utilización eficiente de recursos naturales escasos, la reducción de residuos y la utilización eficaz de la energía.

3.Objetivos y competencias

3.1.Objetivos

El objetivo global de la asignatura es proporcionar al alumno una formación avanzada en Catálisis relacionada con los principios, mecanismos y aplicaciones de los diferentes tipos de catalizadores que operan tanto en fase homogénea, catalizadores organometálicos y organocatalizadores, como en fase heterogénea.

3.2.Competencias

Aplicar los conocimientos adquiridos para abordar el estudio de nuevas transformaciones catalíticas dentro de un contexto de investigación.

60452 - Catálisis

Aplicar conceptos de química inorgánica, orgánica y organometálica al diseño de catalizadores.

Trasladar los principios de la catálisis a la preparación de productos químicos a escala de laboratorio observando las normas de sostenibilidad y el respeto ambiental.

Identificar y utilizar las fuentes bibliográficas más habituales en catálisis en un contexto de investigación.

Valorar el potencial de la catálisis para afrontar los nuevos retos para un desarrollo sostenible.

Comunicar las conclusiones de un estudio de investigación en el campo de la catálisis.

4. Evaluación

4.1. Tipo de pruebas, criterios de evaluación y niveles de exigencia

La evaluación de esta asignatura está basada en las siguientes actividades con la ponderación que se indica:

1.- Controles de resolución de problemas y cuestiones teórico-prácticas del Módulo 1 y del Módulo 2 que podrán eliminar materia cuando se obtenga una calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10 en cada uno de ellos (**P1** y **P2**).

2.- Resolución de ejercicios prácticos, cuestiones teórico-prácticas y actividades prácticas relacionadas (**T1**).

3.- Preparación y exposición oral de forma individual o en grupo de un trabajo dirigido basado en un artículo científico relacionado con los contenidos de la asignatura (**T2**).

4.- Una prueba escrita dentro del periodo de pruebas globales consistente en la resolución de problemas, cuestiones teóricas y/o teórico-prácticas del Módulo 3 (**P3**). Los estudiantes que no se hubieran presentado a las pruebas **P1** y **P2** o no hubieran alcanzado una puntuación igual o superior a 5 sobre 10, además deberán realizar una prueba consistente en la resolución de problemas, cuestiones teóricas y/o teórico-prácticas de los Módulos que tengan pendientes (**P1'** y **P2'**).

La calificación final será la mejor de las siguientes notas:

$$\text{NOTA 1} = 0.15 \cdot (\text{P1} \text{ ó } \text{P1}') + 0.25 \cdot (\text{P2} \text{ ó } \text{P2}') + 0.20 \cdot \text{P3} + 0.15 \cdot \text{T1} + 0.25 \cdot \text{T2}$$

$$\text{NOTA 2} = 0.25 \cdot (\text{P1} \text{ ó } \text{P1}') + 0.40 \cdot (\text{P2} \text{ ó } \text{P2}') + 0.35 \cdot \text{P3}$$

La calificación de los alumnos en la segunda convocatoria anual se realizará mediante una única prueba escrita que comprenderá todos los temas de teoría, problemas y práctica definidos como actividades de aprendizaje programadas.

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 Máster* y al *Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje* (<http://www.unizar.es/ice/images/stories/calidad/Reglamento%20Evaluacion.pdf>). 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.

5. Metodología, actividades, programa y recursos

5.1. Presentación metodológica general

1.- Clases teóricas (4 ECTS)

2.- Resolución de problemas y seminarios (1.5 ECTS)

3.- Prácticas de Laboratorio (0.5 ECTS)

5.2. Actividades de aprendizaje

Adquisición de conocimientos avanzados de Catálisis. Esta actividad comprende 40 horas presenciales de clases expositivas-interactivas en grupo grande.

Clases de resolución de problemas y seminarios. Esta actividad comprende 15 horas de clases presenciales en las que los alumnos, de forma individual o en grupo, resolverán casos prácticos y trabajarán artículos científicos relacionados con los contenidos de la asignatura.

Tutorías. Los alumnos dispondrán de 3 horas semanales para tutorías individualizadas.

Prácticas de laboratorio. Esta actividad comprende 5 horas y son obligatorias. Las prácticas de la asignatura junto a las de otras asignaturas del *Módulo Química Molecular y Catálisis* constituyen un bloque integrado.

5.3. Programa

El programa teórico de la asignatura consta de los siguientes bloques temáticos:

Modulo 1

Conceptos básicos de catálisis

Catálisis: conceptos generales. Catálisis y química sostenible. Tipos de catalizadores: catalizadores homogéneos, heterogéneos y biocatalizadores. Actividad y selectividad de los catalizadores. Cuantificación del impacto medioambiental. Importancia económica de la catálisis. Catálisis en la frontera: energía y medioambiente.

Fundamentos de catálisis organometálica

Diseño y modo de acción de los catalizadores organometálicos. Ligandos y diseño de catalizadores. Mecanismos de reacción: aspectos termodinámicos y cinéticos. Reacciones fundamentales: sustitución, adición, eliminación, inserción, ataque nucleófilo.

Modulo 2

Catálisis organometálica en fase homogénea: aplicaciones

Reacciones de hidrogenación y transferencia de hidrógeno, mecanismos. Reacciones de hidrofuncionalización: hidrocianación, hidrosililación, hidroboración e hidroaminación. Reacciones de carbonilación: carbonilación de metanol, carbonilación de olefinas: hidroformilación, hidroaminometilación, hidrocarboxilación e hidroesterificación. Reacciones de acoplamiento C-C: funcionalización de alquinos y reacciones de acoplamiento cruzado. Activación C-H: mecanismos. Reacciones de activación/funcionalización C-H: reacciones de acoplamiento oxidante, reacciones de hidroarilación e hidroacilación, funcionalización de hidrocarburos. Metátesis de olefinas: diseño de catalizadores y aplicaciones. Metátesis de alquinos.

Modulo 3**Organocatálisis**

Introducción a la organocatálisis asimétrica. Modo de activación de los organocatalizadores: formación de enlaces covalentes, formación de enlaces de hidrógeno, interacciones débiles, catalizadores de transferencia de fase. Mecanismos de acción y ejemplos representativos.

Catálisis heterogénea

Principios y conceptos de la catálisis heterogénea. Clasificación de los catalizadores heterogéneos en función de la estructura y composición. Catalizadores soportados. Estrategias de inmovilización: interacciones de tipo covalente y no covalente. Inmovilización no covalente: adsorción, interacción electrostática, enlaces de hidrógeno, encapsulación. Nanocatálisis. Procesos de catálisis heterogénea de interés industrial y medioambiental.

5.4. Planificación y calendario

Toda la información sobre horarios, calendario y exámenes se publica en la web de la Facultad de Ciencias: <https://ciencias.unizar.es/calendario-y-horarios>, y en la web del Máster: <http://masterqmch.unizar.es>. La presentación de trabajos se realizará de acuerdo al calendario que se anunciará oportunamente.

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://moodle2.unizar.es/add>).

5.5. Bibliografía y recursos recomendados

BB Berkessel, Albrecht. *Asymmetric Organocatalysis: from biomimetic concepts to applications in asymmetric synthesis* / Albrecht Berkessel, Harald Gröger. - 1st ed., 1st repr. Weinheim: Wiley-VCH, 2005

BB Crabtree, Robert H. *The organometallic chemistry of the transition metals* / Robert H. Crabtree. 5ª ed. Hoboken, N.J.: Wiley, 2009

BB *Fundamentos y aplicaciones de la catálisis homogénea* / editado por Luis A. Oro y Eduardo Sola. 1ª ed. Zaragoza: Luis A. Oro y Eduardo Sola, 2000

BB *Fundamentos y aplicaciones de la catálisis homogénea* / editado por Luis A. Oro y Eduardo Sola. 2ª ed. Zaragoza: Luis A. Oro y Eduardo Sola, 2000

60452 - Catálisis

- BB** Hartwig, John F. Organotransition metal chemistry: from bonding to catalysis / John F. Hartwig Sausalito, Ca.: University Science Books, 2010
- BB** Leeuwen, Piet W. N. M. van. Homogeneous catalysis: understanding the art / Piet W.N.M. van Leeuwen Dordrecht [etc.]: Kluwer Academic Publishers, 2004
- BB** Ross, Julian R. H. Heterogeneous catalysis: fundamentals and applications / Julian R. H. Ross Amsterdam [etc.]: Elsevier, cop. 2012 [i.e. 2011]
- BB** Rothenberg, Gadi. Catalysis: concepts and green applications / Gadi Rothenberg Weinheim: Wiley-VCH, cop. 2008
- BC** Barbaro, P. Heterogenized Homogeneous Catalysts for Fine Chemicals Production: Materials and Processes. Ed. Springer, 2010
- BC** Behr, Arno. Applied homogeneous catalysis / Arno Behr and Peter Neubert Weinheim: Wiley-VCH, cop. 2012
- BC** Hagen, Jens. Industrial catalysis: a practical approach / Jens Hagen. 2nd completely rev. and extended ed. Weinheim: Wiley-VCH, cop. 2006
- BC** Hegedus, Louis S. Transition metals in the synthesis of complex organic molecules / Louis S. Hegedus. 3rd ed. Sausalito, California: University Science Books, cop. 2010
- BC** Metal-catalysis in industrial organic processes / edited by Gian Paolo Chiusoli, Peter M. Maitlis Cambridge: Royal Society of Chemistry, cop. 2006
- BC** Pihko, P. M. Hydrogen Bonding in Organic Synthesis. Wiley-VCH, 2009
- BC** Serp, P. Nanomaterials in Catalysis. Wiley-VCH, 2013
- BC** Sheldon, Roger A. Green chemistry and catalysis / Roger Arthur Sheldon, Isabel Arends, and Ulf Hanefeld Weinheim: Wiley-VCH, cop. 2007