

## 60452 - Catálisis

### Información del Plan Docente

**Año académico:** 2020/21

**Asignatura:** 60452 - Catálisis

**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

**Materia:** ---

## 1. Información Básica

### 1.1. Objetivos de la asignatura

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.

### 1.2. Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

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.

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 (Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea), 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.

### 1.3. 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.

## 2. Competencias y resultados de aprendizaje

### 2.1. Competencias

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

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.

### 2.2. Resultados de aprendizaje

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.

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.

### 2.3.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.Evaluación

### 3.1.Tipo de pruebas y su valor sobre la nota final y criterios de evaluación para cada prueba

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

1.- Un control de resolución de problemas, cuestiones teóricas y/o teórico-prácticas (**P1**) de los **Temas 1-8**. Este control podrá eliminar materia siempre que se obtenga una calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10.

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 (**P2**) correspondiente a los **Temas 9-14**. Los estudiantes que no se hubieran presentado a la prueba **P1** o no hubieran alcanzado una puntuación igual o superior a 5 sobre 10, deberán realizar además una prueba (**P1'**) consistente en la resolución de problemas, cuestiones teóricas y/o teórico-prácticas de la primera parte de la asignatura.

Para superar la asignatura es necesario obtener una puntuación igual o superior a 5 puntos sobre 10 en cada una de las dos pruebas **P1(P1')** y **P2**.

La calificación final será la mejor de las siguientes notas:

$$\text{NOTA 1} = 0.35*(\text{P1} \text{ ó } \text{P1}') + 0.35*(\text{P2}) + 0.15* \text{T1} + 0.15*\text{T2}$$

$$\text{NOTA 2} = 0.50*(\text{P1} \text{ ó } \text{P1}') + 0.50*(\text{P2})$$

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* (<https://ciencias.unizar.es/normativas-asuntos-academicos>). 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.

## 4.Metodología, actividades de aprendizaje, programa y recursos

### 4.1.Presentación metodológica general

1.- Clases teóricas (4 ECTS)

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

3.- Prácticas de Laboratorio (0.5 ECTS)

### 4.2.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.

Las actividades docentes y de evaluación se desarrollarán de modo presencial salvo que, debido a la situación sanitaria, las disposiciones emitidas por las autoridades competentes y por la Universidad de Zaragoza dispongan realizarlas de forma telemática. Si el número de las/os estudiantes matriculadas/os supera el aforo establecido del aula la impartición de la docencia seguirá las directrices de la Facultad de Ciencias y/o de la Universidad de Zaragoza. Las prácticas de ordenador

se realizarán de modo presencial en el aula de informática respetando el aforo establecido. En las clases prácticas de laboratorio, en las que el desarrollo docente requiere generalmente movilidad dentro del espacio físico, se hará uso de mascarillas adecuadas al tipo de actividad. La actividad tutorial se realizará preferentemente a distancia.

### 4.3. Programa

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

#### Conceptos básicos de catálisis

**Tema 1.** Catálisis: conceptos generales.

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

#### Fundamentos de catálisis organometálica

**Tema 2.** Catálisis homogénea con compuestos de metales de transición.

Características generales de los catalizadores basados en metales de transición. Ligandos y diseño de catalizadores. Efecto quelato, efecto quelato. Enlace en los compuestos de coordinación y organometálicos.

**Tema 3.** Mecanismos de reacción: aspectos termodinámicos y cinéticos.

Diagramas de coordenadas de reacciones catalíticas. Ciclo catalítico: especies constituyentes, pasos y estado de reposo del catalizador. Modelos cinéticos para reacciones en dos etapas. Determinación de la selectividad.

**Tema 4.** Procesos Fundamentales

Reacciones de sustitución de ligandos. Adición oxidante. Eliminación reductora. Metátesis de enlaces. Inserción migratoria. Eliminación  $\beta$  de hidrógeno. Eliminación y abstracción de hidrógeno. Ataque nucleofílico sobre ligandos coordinados. Ataque electrofílico sobre ligandos coordinados. Reacciones de transmetalación.

#### Catálisis organometálica en fase homogénea: aplicaciones

**Tema 5.** Reacciones de hidrogenación y transferencia de hidrógeno.

Introducción. Hidrogenación de alquenos: catalizadores y mecanismos. Hidrogenación asimétrica. Hidrogenación asimétrica de cetonas. Transferencia de hidrógeno: mecanismos.

**Tema 6.** Reacciones de hidrofuncionalización.

Introducción. Reacciones de hidrofuncionalización: hidrocianación, hidrosililación, hidroboración e hidroaminación.

**Tema 7.** Reacciones de carbonilación.

Introducción. Carbonilación de metanol. Carbonilación de olefinas: hidroformilación, hidroaminometilación, hidrocarboxilación e hidroesterificación. Carbonilación de halogenuros orgánicos. Copolimerización de CO y olefinas.

**Tema 8.** Reacciones de acoplamiento carbono-carbono.

Acoplamiento cruzado. Diseño del catalizador y ligandos. Reacción de Heck. Acoplamiento oxidante de alquinos. Dimerización y polimerización de alquinos.

**Tema 9.** Activación C-H.

Conceptos fundamentales y mecanismos. Grupos directores. Reacción de Fujiwara. Reacción de Murai. Hidroacilación. Reacciones de activación  $C(sp^3)$ -H.

**Tema 10.** Metátesis de olefinas.

Preparación de metal-alquilidenos. Diseño de catalizadores. Tipos de reacciones de metátesis. Selectividad. Metátesis de alquinos.

#### Organocatálisis

**Tema 11.** Activación por enlaces covalentes.

Introducción a la organocatálisis asimétrica. Modo de activación de los organocatalizadores. Organocatalizadores que actúan mediante formación de enlaces covalentes. Mecanismos de acción y ejemplos representativos.

**Tema 12.** Activación por enlaces de hidrógeno.

Organocatalizadores que actúan mediante enlaces de hidrógeno, interacciones débiles, catalizadores de transferencia de fase. Mecanismos de acción y ejemplos representativos.

#### Catálisis Soportada

**Tema 13.** Introducción a la catálisis heterogénea

Principios y conceptos de la catálisis heterogénea. Clasificación de los catalizadores heterogéneos en función de su composición.

**Tema 14.** Catálisis Soportada.

Introducción a la catálisis soportada. Metodologías generales de preparación y caracterización de catalizadores soportados. Ejemplos de procesos industriales que aplican catalizadores soportados.

### 4.4. Planificación de las actividades de aprendizaje y calendario de fechas clave

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>).

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*, 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.

#### **4.5. Bibliografía y recursos recomendados**