

27232 - Catálisis homogénea

Información del Plan Docente

Año académico: 2023/24

Asignatura: 27232 - Catálisis homogénea

Centro académico: 100 - Facultad de Ciencias

Titulación: 452 - Graduado en Química

Créditos: 5.0

Curso: 4

Periodo de impartición: Segundo semestre

Clase de asignatura: Optativa

Materia:

1. Información básica de la asignatura

El objetivo global de la asignatura es que los estudiantes comprendan el mecanismo de una reacción catalítica y sepan cómo utilizar dicha información para diseñar un catalizador homogéneo más efectivo.

Para ello se plantean objetivos particulares, como son estudiar las reacciones fundamentales que tienen lugar en procesos de catálisis homogénea catalizados por complejos de metales de transición y explicar los conceptos de especie activa, precursor catalítico, intermedio de reacción y estado de transición, relacionándolos con la energía de activación. Todo ello se realizará en el contexto de procesos industriales de relevancia que emplean catalizadores homogéneos. Además, se estudiarán los retos científicos e industriales en este área de la química.

2. Resultados de aprendizaje

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados:

1. Comprende las reacciones fundamentales en catálisis homogénea.
2. Conoce las reacciones catalíticas homogéneas catalizadas por complejos de metales de transición, sus mecanismos de reacción y sus aplicaciones industriales.
3. Elige el catalizador homogéneo más adecuado para un proceso sintético.
4. Propone el ciclo catalítico operativo en la preparación de un producto.
5. Elabora, expone y defiende trabajos tutelados básicos de catálisis homogénea.

Los conocimientos adquiridos en la asignatura deben proporcionar al alumno una visión global del impacto de la catálisis homogénea en la industria química y de las expectativas que genera tanto en investigación básica como aplicada. El uso de catalizadores en medio homogéneo hace posible transformaciones químicas selectivas en condiciones muy suaves, metodologías de síntesis más eficientes, y el desarrollo de una industria química con bajo impacto medioambiental.

3. Programa de la asignatura

Introducción

Conceptos básicos. Características de la catálisis homogénea y heterogénea. Conceptos de selectividad en procesos catalíticos. Catálisis y química "verde". Compuestos de coordinación y catálisis homogénea. Regla de los 18 electrones. Insaturación coordinativa. Efectos electrónicos y estéricos de los ligandos. Efecto e influencia trans.

Reacciones de adición oxidante y eliminación reductora

Características de las reacciones de adición oxidante. Tipos de reacciones de adición oxidante. Mecanismos de las reacciones de adición oxidante. Adición oxidante de enlaces C-H. Reacciones de eliminación reductora.

Reacciones de inserción y eliminación. Reacciones de ataque a ligandos coordinados

Reacciones de inserción y eliminación. Mecanismo de las reacciones de inserción. Características de las reacciones de inserción. Eliminaciones alfa y beta. Modificaciones en la reactividad de ligandos coordinados. Reacciones de ataque a ligandos coordinados.

Isomerización

Isomerización de alquenos: isomerización de posición, isomerización cis-trans, isomerización esqueletal. Isomerización asimétrica: síntesis de mentol.

Hidrogenación

Activación de hidrógeno. Mecanismos de hidrogenación homogénea. Catalizadores de hidrogenación representativos: Hidrogenación asimétrica. Mecanismos no clásicos: bifuncional, iónico. Reacciones de transferencia de hidrógeno.

Carbonilación

Reacciones de carbonilación. Carbonilación de metanol. Carbonilación de acetato de metilo. Hidroformilación. Copolimerización de olefinas y monóxido de carbono.

Oxidación de alquenos

Reacciones de oxidación. El proceso Wacker. Epoxidación de olefinas. Dihidroxiación de olefinas. Oxidación de enlaces C-H.

Polimerización y oligomerización.

Polimerización de olefinas. Catalizadores Ziegler-Natta, metallocenos, otros catalizadores. Mecanismo de las reacciones de polimerización. Dimerización y oligomerización. Proceso SHOP (Shell Higher Olefin Process).

Metátesis de olefinas

Reacciones de metátesis. Metátesis de olefinas acíclicas y cíclicas. Mecanismo de las reacciones de metátesis de olefinas. Tipos de catalizadores de metátesis. Aplicaciones de las reacciones de metátesis.

Hidrocianación e hidrosililación

Reacciones de hidrocianación. Reacciones de hidrosililación. Mecanismos de las reacciones de hidrosililación.

Reacciones de acoplamiento carbono-carbono

Reacciones de acoplamiento carbono-carbono: Reacción de Heck. Reacciones de acoplamientos carbono-carbono vía transmetalación. Otras reacciones de acoplamiento.

4. Actividades académicas

1.- **Clases Magistrales en el aula:** Adquisición de conocimientos básicos de Catálisis Homogénea. Esta actividad comprende 40 horas presenciales de clases expositivas-interactivas en grupo grande.

2.- **Clases de resolución de problemas y seminarios.** Esta actividad comprende 10 horas de clases presenciales en las que los alumnos, de forma individual o en grupo, resolverán problemas propuestos y debatirán sobre temas relacionados con el programa de la asignatura.

3.- **Tutorías.** Los alumnos dispondrán de 6 horas semanales para tutorías individualizadas.

Las actividades docentes y de evaluación se llevarán a cabo de modo presencial salvo que, debido a la situación sanitaria, las disposiciones emitidas por las autoridades competentes y por la Universidad de Zaragoza obliguen a realizarlas de forma telemática o semi-telemática con aforos reducidos rotatorios.

5. Sistema de evaluación

Evaluación continua

1.- Se realizarán dos pruebas de evaluación continua, que consistirán en preguntas de respuesta corta y de preguntas tipo ensayo. En la primera prueba se evaluarán los temas 1 (Introducción) al 5 (Hidrogenación) y en la segunda prueba se evaluará el resto de los temas.

Para superar ambas pruebas será necesario obtener una calificación de 5 puntos sobre 10 en cada una de ellas. Los estudiantes que obtengan una calificación inferior a 5, pero igual o superior a 4, en una de las pruebas podrán promediar con la nota de otra prueba y deberán alcanzar una nota promedio igual o superior a 5. Esta nota es la calificación C1.

2.- Además, se realizarán un control de problemas, que consistirá en ejercicios similares a los propuestos en los seminarios. La nota del control de problemas será la calificación C2.

La nota de la asignatura correspondiente a la modalidad de evaluación continua será C3 y se calculará como la más favorable de las siguientes fórmulas:

$$C3 = C1 \times 0.85 + C2 \times 0.15$$

$$C3 = C1$$

Prueba global

Los estudiantes que no hayan superado la asignatura mediante evaluación continua o que deseen subir nota realizarán una prueba global en las fechas asignadas en el calendario de exámenes de la Facultad. Dicha prueba constará de preguntas de preguntas de respuesta corta y de preguntas tipo ensayo. Para aprobar será necesario alcanzar una calificación mínima de 5 puntos (sobre 10).