

**Guía docente de la asignatura**

Asignatura	CATÁLISIS HOMOGÉNEA		
Titulación	Máster en Química Sintética e industrial		
Plan	558	Código	
Periodo de impartición	2º cuatrimestre	Tipo/Carácter	OPTATIVA
Créditos ECTS	3		
Lengua en que se imparte	Español, inglés (solo si hay alumnos no hispanoparlantes)		
Profesor/es responsable/s	Juan A. Casares González		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	casares@qi.uva.es		
Horario de tutorías	Lunes miércoles y jueves de 11 a 13 horas		
Departamento	Química Física y Química Inorgánica		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

La recogida en el documento VERIFICA

1.2 Relación con otras materias

La recogida en el documento VERIFICA

1.3 Prerrequisitos

Los necesarios para cursar el Máster





2. Competencias

Las recogidas en el Plan de Estudios del Máster

2.1 Generales

- G1.- Conocimiento del método científico.
- G2.- Competencia para aplicar los conocimientos adquiridos.
- G3.- Capacidad crítica, de análisis y síntesis, y capacidad de interpretación.
- G4.- Competencias metodológicas.
- G5.- Capacidad para valorar la originalidad y creatividad.
- G6.- Capacidades de comunicación.
- G7.- Capacidad de trabajo en equipo.
- G8.- Capacidad para el uso de las nuevas tecnologías.
- G9.- Desarrollar el interés por la formación permanente.
- G10.- Capacidad de aprendizaje autónomo.

2.2 Específicas

Capacidad para estudiar las reacciones involucradas en sistemas de catálisis homogénea y diseñar sistemas catalíticos de forma racional



3. Objetivos

Objetivos globales

- Comprender la metodología aplicada al estudio de sistemas catalíticos
- Comprender los fundamentos mecanísticos de los procesos catalizados por metales
- Conocer los principales métodos de preparación y caracterización de catalizadores
- Aplicar reacciones y procesos catalíticos para síntesis de compuestos de interés





4. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	20	Estudio y trabajo autónomo individual*	
Clases prácticas	8	Estudio y trabajo autónomo grupal*	
Laboratorios			
Prácticas externas, clínicas o de campo			
Seminarios			
Otras actividades	2		
Total presencial	30	Total no presencial	

*Dado su grado de formación, los alumnos tienen autonomía para decidir si prefieren estudiar la asignatura individualmente o de forma grupal, así como para definir la actividad concreta en cada caso, hasta completar el tiempo correspondiente a los créditos de la asignatura.





5. Bloques temáticos

TEMA 1. PRINCIPIOS DE CATÁLISIS

Aspectos termodinámicos. Cinética. Reacciones elementales y reacciones consecutivas. Sistemas cinéticamente complejos. Simulación mediante COPASI. Eficacia de los ciclos, TOF, RDS y RDST. Grado de control cinético. Selectividad. Principio de Curtin Hammett. Enantioselectividad. Análisis de cinéticas globales: “High Throughput Kinetics”. Experimentos mecanísticamente significativos: reacciones competitivas, efectos isotópicos, análisis de selectividad. Química Computacional en Catálisis Homogénea. Relación de datos experimentales y mecanismos: Combinación COPASI-DFT.

TEMA 2. COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS DE LOS METALES DE TRANSICIÓN.

La regla de los 18 electrones como guía estructural y de reactividad. Ligandos: propiedades electrónicas y estéricas. Ligandos no inocentes.

TEMA 3. PROCESOS ELEMENTALES DE REACTIVIDAD EN CATÁLISIS HOMOGÉNEA

La activación y formación de enlaces por metales. Reacciones de adición oxidante/eliminación reductora. Reacciones de inserción/extrusión, β -eliminación. Activación C-H y C-E. Reacciones fuera de la esfera de coordinación.

TEMA 4. SISTEMAS CATALÍTICOS REPRESENTATIVOS

Reacciones de adición.
Reacciones de acoplamiento.
Reacciones de metátesis.
Reacciones de oxidación.

Métodos docentes y plan de trabajo

Tipo	Horas presenciales	Horas no presenciales	Horas totales
Magistral	12	18	30
Seminario	8	12	20
P. de Aula	10	15	25

Evaluación



Denominación	Ponderación mínima	Ponderación máxima
Examen escrito	50 %	65 %
Trabajos Prácticos (Puede incluir su exposición)	35 %	50 %

Bibliografía básica

TITU

J. Hartwig, Organotransition metal chemistry : from bonding to catalysis, University Science Books, Sausalito, 2010

B. Cornils y W. A. Herrmann, Applied homogeneous catalysis with organometallic compounds : a comprehensive handbook in three volumes, VCH, 2002

H. Kurosawa y A. Yamamoto. Eds. "Fundamentals of molecular catalysis. Current methods in inorganic chemistry" vol. 3, Elsevier, Amsterdam, 2003

M. Beller y H.U. Blaser, Eds. "Organometallics as Catalysts in the Fine Chemical Industry". Topics in Organometallic Chemistry, Spriger, Berlin, 2012

Recursos necesarios

Recursos de aprendizaje:

Apoyo tutorial: Los alumnos pueden concertar tutorías en las horas de tutoría de los profesores, preferiblemente comunicándolo por correo electrónico con 24 h de anticipación.



6. Temporalización (por bloques temáticos)

BLOQUE TEMÁTICO	CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO

7. Sistema de calificaciones – Tabla resumen

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Trabajos durante el curso	35 %	
Examen final	65 %	

Al final de este apartado o en el de Consideraciones Finales se hará constar, si es diferente al de la primera, el sistema de calificación que se seguirá en la segunda y posteriores convocatorias. Dicho sistema ha de permitir que los estudiantes que acudan a estas convocatorias puedan superar la asignatura en las mismas

8. Consideraciones finales

En la segunda convocatoria se considerará únicamente la calificación obtenida en un examen global.