



## Guía docente de la asignatura

<b>Asignatura</b>	<b>CATÁLISIS HOMOGÉNEA</b>		
<b>Titulación</b>	Máster en Química Sintética e industrial		
<b>Plan</b>	558	<b>Código</b>	
<b>Periodo de impartición</b>	2º cuatrimestre	<b>Tipo/Carácter</b>	OPTATIVA
<b>Créditos ECTS</b>	3		
<b>Lengua en que se imparte</b>	Español, inglés (solo si hay alumnos no hispanoparlantes)		
<b>Profesor/es responsable/s</b>	Juan A. Casares González		
<b>Datos de contacto (E-mail, teléfono...)</b>	casares@qi.uva.es		
<b>Horario de tutorías</b>	Lunes miércoles y jueves de 11 a 13 horas		
<b>Departamento</b>	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		
<b>Total presencial</b>	<b>30</b>	<b>Total no presencial</b>	

\*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,  $\beta$ -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.