

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

Asignatura	Catálisis Homogénea		
Materia			
Módulo			
Titulación	Máster en Química Sintética e Industrial		
Plan	558	Código	52263
Periodo de impartición	2º cuatrimestre	Tipo/Carácter	Optativa
Nivel/Ciclo	Máster	Curso	
Créditos ECTS	3		
Lengua en que se imparte	Español		
Profesor/es responsable/s	Juan A. Casares González		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	juanangel.casares@uva.es		
Horario de tutorías	Consultar Campus Virtual		
Departamento	Química Física y Química Inorgánica		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

En esta asignatura se amplían los conocimientos y conceptos de las asignaturas de las áreas de Química Orgánica y Química Inorgánica, particularmente de Química de Coordinación y de Síntesis Química para aplica a la comprensión de los fenómenos de Catálisis Homogénea.

1.2 Relación con otras materias

La asignatura está íntimamente relacionada con el resto de las asignaturas del máster, complementa a las de “Metales en Síntesis”, “Síntesis Estereocontrolada” y “Síntesis Química Avanzada”. Metodológicamente, se hace uso de conceptos relacionados con las asignaturas “Métodos de Determinación Estructural”, “Difracción de RX” y de “Química Teórica y Computacional”.



2. Competencias

Las que aparecen definidas en el plan de estudios.

2.1 Generales

G1- Integrar conceptos avanzados de los diferentes aspectos de la Síntesis Química, y aplicarlos a la resolución de problemas en entornos nuevos dentro de contextos más amplios o multidisciplinares, en el ámbito de la investigación o la industria

G2-Desarrollar iniciativa para la investigación el desarrollo y la innovación, dirigiendo o incorporándose a grupos de trabajo

G4-Redactar informes científicos y técnicos, y exponer ponencias y presentaciones ante público especializado

G5-Analizar de manera crítica la información de la bibliografía e integrarla para plantear y contextualizar un tema de investigación en el ámbito de la Síntesis Química.

2.2 Específicas

E1-Proyectar y desarrollar secuencias sintéticas para acceder a productos químicos de manera eficaz, utilizando las metodologías más adecuadas

CE11957 - Seleccionar y aplicar metodologías sintéticas eficientes a la síntesis de compuestos de interés

CE11958 - Identificar y discutir las etapas clave de una secuencia de síntesis,

CE11953 - Comprender la estructura y propiedades de los principales tipos de compuestos organometálicos

CE11954 - Conocer y aplicar los métodos de síntesis de compuestos organometálicos

CE11955 - Comprender el papel de los metales y de los compuestos organometálicos en en síntesis, aplicándolos a problemas sintéticos concretos

CE11959 - Comprender los fundamentos para efectuar procesos estereocontrolados, así como los factores que los gobiernan

CE11960 - Comprender y aplicar nuevas metodologías de síntesis enantio y diastereoselectiva

CE2282 - e-3. Analizar, discutir y obtener conclusiones los datos obtenidos de manera autónoma en los experimentos de laboratorio relacionándolos con las teorías apropiadas y utilizando fuentes las bibliográficas primarias

CE2304 - e-4. Comprender la reactividad de metales y de los compuestos organometálicos y su aplicación como reactivos y como catalizadores en síntesis

CE2814 - e-5. Comprender y aplicar nuevas metodologías de síntesis estereocontrolada

EH.4- Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información química y datos químicos.

EH.5- Ser capaz de comunicar información química y argumentar sobre ella.



3. Objetivos

Como resultado de la realización de las actividades formativas y el estudio de los contenidos de la asignatura, los alumnos han de conseguir:

- Comprender los fundamentos mecanísticos de los procesos catalizados por metales
- Comprender la metodología de estudio de los fenómenos de catálisis homogénea
- Familiarizarse con la terminología aplicada en la literatura de catálisis homogénea según el estado del arte.
- Conocer los principales métodos de preparación y caracterización de catalizadores
- Aplicar reacciones y procesos catalíticos para síntesis de compuestos de interés





4. Contenidos y/o bloques temáticos

Principios de catálisis. Compuestos organometálicos de los metales de transición. La regla de los 18 electrones como guía estructural y de reactividad. Ligandos. Procesos elementales de reactividad en catálisis homogénea. Ciclos catalíticos como combinación de procesos básicos. La catálisis homogénea en procesos industriales de gran producción y en procesos industriales de química fina.

Los contenidos se articulan en los siguientes bloques y temas

Bloque 1: Metodología para el estudio de sistemas de catálisis homogénea.

Introducción: Principios de catálisis, compuestos organometálicos y regla de los 18 e⁻.

Aspectos termodinámicos. Cinética. Reacciones elementales y reacciones consecutivas.

Selectividad.

Simulación mediante COPASI. Microcinética.

Análisis de cinéticas globales: Metodología RPKA (Reaction Progress Kinetic Analysis)".

Bloque 2: Reacciones básicas en sistemas catalíticos

Reacciones de adición.

Reacciones de acoplamiento.

Reacciones de metátesis.

Reacciones de oxidación.

Bloque 3: Aplicaciones seleccionadas: Catálisis y Cambio Climático

Activación de CO₂: Hidrogenación. Incorporación de CO₂ a moléculas orgánicas. Fotosíntesis artificial. Descomposición fotoquímica de agua. Reacciones de transferencia de radicales.

d. Métodos docentes

Las clases teóricas corresponden a lecciones magistrales participativas en las que el alumno interviene mediante la formulación de preguntas al profesor o contestando las que el profesor plantea a lo largo de la impartición de los contenidos.

Las clases de problemas y seminarios consisten en la resolución de ejercicios y casos prácticos.

Los alumnos realizan ejercicios sobre artículos bibliográficos recientes relacionados con la asignatura.

Los alumnos participarán en sesiones de tutorías con el profesor de la asignatura. En ellas se trabaja sobre las dificultades concretas que plantea cada alumno.

El trabajo autónomo, no presencial, de los alumnos viene a constituir un 60% de la carga de trabajo global

e. Plan de trabajo



La asignatura se desarrollará comenzando por el bloque A seguido de los bloques B y C. Tras la transmisión de información a través de clases magistrales (usando diversos medios didácticos: pizarra, medios audiovisuales e informáticos, demostraciones puntuales, etc.) se trabajará en la resolución de problemas y ejercicios que previamente distribuidos a los alumnos. Las tutorías se llevarán a cabo a lo largo de todo el periodo lectivo.

Dada la dispersión geográfica de los alumnos atendidos en el Máster, las clases se impartirán por videoconferencia.

f. Evaluación

La evaluación de los alumnos se realizará mediante evaluación continua, valoración de trabajos escritos individuales sobre temas propios de la asignatura, y un examen escrito.

g. Bibliografía básica

La bibliografía actualizada de revisiones científicas se proporciona en cada tema. De forma general se pueden consultar los siguientes textos:

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

R. H. Crabtree "The organometallic chemistry of the transition metals" 6th ed.; Wiley&Sons, 2014

j. Temporalización (por bloques temáticos)

BLOQUE TEMÁTICO	CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
Bloque A: Metodología para el estudio de sistemas de catálisis homogénea	1	Primeras 12 horas presenciales
Bloque B: Sistemas catalíticos representativos	1	9 h
Bloque A: Aplicaciones seleccionadas: Catálisis y Cambio Climático	1	9 h



5. Métodos docentes y principios metodológicos

Ver apartado 4d

6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORA S	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORA S
Clases teóricas	20	Preparación y estudio personal de los contenidos teóricos	20
Clases prácticas	5	Preparación y resolución de ejercicios y problemas	10
Laboratorios		Estudio y preparación de exámenes	15
Prácticas externas, clínicas o de campo			
Seminarios	5		
Otras actividades	0		
Total presencial	30	Total no presencial	45



7. Sistema y características de la evaluación – Tabla resumen

El peso de los distintos bloques en que se divide la asignatura y los procedimientos de evaluación en la calificación final se especifican en la siguiente tabla.

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Evaluación continua	30%	
Trabajo bibliográfico entregable	30%	
Examen final	40%	

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**
Es necesario obtener una calificación de 5 sobre 10 en el conjunto de las actividades de evaluación de la asignatura.
- **Convocatoria extraordinaria:**
Es necesario obtener una calificación de 5 sobre 10 en la evaluación de la asignatura.

8. Consideraciones finales