



Máster en Química Molecular y Catálisis Homogénea 60459 - Catálisis asimétrica

Guía docente para el curso 2014 - 2015

Curso: 1, Semestre: 2, Créditos: 2.0

Información básica

Profesores

- **María del Pilar Lamata Cristóbal** plamata@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se requiere el dominio de conceptos básicos de Química Inorgánica, Orgánica, Organometálica y de Catálisis. La asistencia a clase y el estudio continuado son fundamentales para que el alumno alcance de manera satisfactoria el aprendizaje propuesto.

Actividades y fechas clave de la asignatura

Las actividades programadas se realizarán durante el segundo semestre en sesiones de dos horas semanales. Toda la información sobre horarios, calendario y exámenes está disponible en: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>. La presentación de trabajos se realizará de acuerdo al calendario que se anunciará oportunamente con suficiente antelación.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

- 1:** Conocer los principios generales de estereoquímica y estereodiferenciación en catálisis.
- 2:** Conocer los procesos catalíticos enantioselectivos más importantes desde el punto de vista industrial y tecnológico.
- 3:** Analizar los parámetros más relevantes que caracterizan la eficiencia de un catalizador en reacciones asimétricas.
- 4:** Evaluar el potencial en catálisis asimétrica de catalizadores homogéneos en función de la naturaleza de los mismos.

5: Comprender e interpretar nuevo conocimiento en catálisis asimétrica.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

El campo de estudio de la asignatura es la aplicación de compuestos quirales como catalizadores en síntesis asimétrica. Se aborda el diseño de ligandos y de compuestos quirales de metales de transición, para su aplicación en catálisis asimétrica. Se profundiza en el estudio del mecanismo de reacción de los principales sistemas catalíticos enantioselectivos, y se estudian sus aplicaciones prácticas.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

El objetivo global de la asignatura es estudiar los principios generales de la catálisis asimétrica, y los principales sistemas catalíticos basados en compuestos quirales de metales de transición, enfatizando en el estudio de los mecanismos de reacción.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La Catálisis Asimétrica es un área fundamental dentro de la Catálisis y está estrechamente relacionada con otras áreas de la Química como la Química Inorgánica y Organometálica, y la Química Orgánica. La asignatura *Catálisis Asimétrica* es una asignatura optativa de 2 ECTS que se imparte en el segundo cuatrimestre. La asignatura se encuadra dentro del módulo optativo *Horizontes en Química Molecular*. Los resultados de aprendizaje de esta materia se complementan con los de las tres signaturas incluidas dentro del módulo obligatorio del máster: *Catálisis*, *Estrategias en Síntesis Orgánica Avanzada*, y *Diseño molecular en Química Inorgánica y Organometálica*. Por otra parte, la Catálisis Asimétrica está estrechamente relacionada con las otras materias del módulo optativo: *Química Supramolecular*, *Química de Materiales Avanzados*, *Química en la Frontera con la Biología*, y *Química Sostenible y Catálisis*.

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1:** Identificar conceptos relacionados con la actividad catalítica de compuestos quirales y su aplicación en la síntesis de compuestos ópticamente activos.
- 2:** Generalizar los conocimientos adquiridos y aplicarlos para interpretar potenciales aplicaciones de catalizadores en función de la naturaleza de los mismos.
- 3:** Interpretar y valorar los parámetros más relevantes que caracterizan a las reacciones catalíticas enantioselectivas.
- 4:** Diseñar, planificar y evaluar reacciones orgánicas catalizadas por compuestos quirales de metales de transición.

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

Los resultados de aprendizaje de la asignatura son de gran relevancia debido a la trascendencia del campo de estudio de esta materia. La síntesis asimétrica es una disciplina que desempeña un papel central en la química actual, ya que

industrias tan importantes como las agroquímicas, las de aromas y fragancias, las de polímeros y sobretudo las farmacéuticas, producen y demandan compuestos enantiopuros. Entre las diferentes metodologías accesibles para la preparación de compuestos enantiopuros, la catálisis asimétrica es una metodología competitiva, y de entre los diferentes tipos de catalizadores, las mejores expectativas se centran en el empleo de compuestos complejos de metales de transición.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

- 1:**
La evaluación continua de esta asignatura está basada en las siguientes actividades con la ponderación que se indica:
- 1.- Participación en clase, resolución de ejercicios y cuestiones propuestas por el profesor (40 %).
 - 2.- Presentación oral de los contenidos de artículos científicos seleccionados y participación en la discusión en grupo (60 %).
- 2:**
Los alumnos que no opten por la evaluación continua o que no superen la asignatura por dicho procedimiento podrán realizar una prueba global de evaluación, que supondrá el 100% de la calificación final, tanto en la primera como en la segunda convocatoria. La prueba global consistirá en una prueba escrita basada en cuestiones teórico-prácticas sobre los contenidos abordados en la materia. Los alumnos que quieran mejorar su calificación de evaluación continua también podrán realizar la prueba global en la primera convocatoria, manteniendo la mejor de las calificaciones obtenidas.
- 3:**
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 Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje. 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. Dicha normativa puede consultarse en: <http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>.
-

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

El proceso de aprendizaje diseñado para la asignatura está basado esencialmente en clases expositivas de carácter participativo que se complementarán con clases de seminarios y tutorías. Con objeto de fomentar el espíritu crítico y las habilidades de comunicación se ha planteado la presentación oral de resultados relevantes de la literatura científica y su discusión en grupo.

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

- 1:** Clases expositivo-participativas (1.5 ECTS)
- 2:** Resolución de problemas y seminarios (0.5 ECTS)
- 3:** Trabajos dirigidos presentados en aula.
- 4:** Tutorías en grupo reducido o personalizadas.
- 5:** Todas las actividades previstas están basadas en el siguiente programa:
 - 1.- Metodologías de preparación de compuestos ópticamente activos.
 - 2.- Catálisis asimétrica: principios generales, efectos no lineales.
 - 3.- Catalizadores: diseño de ligandos.
 - 4.- Reacciones catalíticas asimétricas: hidrogenación, transferencia de hidrógeno, isomerización, hidroformilación, formación de enlaces C-C, oxidación.
 - 5.- Nuevas tendencias en catálisis asimétrica.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Los horarios de la asignatura y fechas de exámenes se publican en el tablón de anuncios y en la página web de la Facultad de Ciencias: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>. La presentación de trabajos se realizará de acuerdo al calendario que se anunciará oportunamente con la suficiente antelación.

Bibliografía

Bibliografía Básica

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/>).

- 1.- Asymmetric Catalysis in Organic Synthesis. R. Noyori. Ed. John Wiley & Sons, 1994.
- 2.- Asymmetric Catalysis on Industrial Scale, Challenges, Approaches and Solutions (2ª edición). H. U. Blaser, H. -J. Federsel. Ed. Wiley-VCH, 2010.
- 3.- Catalytic Asymmetric Synthesis (3ª edición). I. Ojima. Ed. Wiley, 2010.
- 4.- Fundamentals of Asymmetric Catalysis. P. J. Walsh, M. C. Kozlowski. Ed. University Science Books, 2009.
- 5.- Chirality in Industry. A. N. Collins, G. N. Sheldrake, J. Crosby. Ed. John Wiley & Sons, 1995. Chirality in Industry II. A. N. Collins, G. N. Sheldrake, J. Crosby. John Wiley & Sons, 1997.

Bibliografía Complementaria

- 1.- Asymmetric Synthesis, The Essentials (2ª edición). M. Christmann, S. Bräse. Ed. Wiley-VCH, 2007.
- 2.- Catalysis in Asymmetric Synthesis (2ª edición). V. Caprio, J. M. J. Williams. Ed. John Wiley & Sons, Chichester, 2009.
- 3.- Metal-Catalysis in Industrial Organic Processes. G. P. Chiusoli, P. M. Maitlis. Ed. The Royal Society of Chemistry, 2006.
- 4.- New Frontiers in Asymmetric Catalysis. K. Mikami, M. Lautens. Ed. John Wiley & Sons, 2007.
- 5.- Principles and Applications of Asymmetric Synthesis. G. -Q. Lin, Y. -M. Li, A. S. C. Chan, Ed. Wiley-Interscience, 2001.

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada