

27232 - Catálisis homogénea

Información del Plan Docente

Año académico: 2022/23

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

1.1. Objetivos de la asignatura

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

El objetivo global de la asignatura es que los estudiantes comprendan el mecanismo de una reacción catalítica y sepan como 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 mundial que emplean catalizadores homogéneos. Además, se estudiarán los retos científicos e industriales en este área de la química.

1.2. Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura Catálisis Homogénea se encuadra en el módulo avanzado del Grado en Química. Es una asignatura optativa que se imparte en el segundo cuatrimestre y tiene una carga lectiva de 5 créditos ECTS. Los contenidos de la asignatura Catálisis Homogénea complementan los conocimientos adquiridos en la asignatura Química Inorgánica II y son fundamentales para comprender la importancia de la catálisis en la industria química, así como para la realización de diversos trabajos de fin de Grado en el área de conocimiento de Química Inorgánica.

1.3. Recomendaciones para cursar la asignatura

Se recomienda haber cursado la asignatura Química Inorgánica II.

Se requiere el dominio de conceptos básicos de estructura, enlace y reactividad de compuestos de coordinación.

La asistencia a clase y el trabajo continuado facilita la superación de la asignatura.

2. Competencias y resultados de aprendizaje

2.1. Competencias

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

Identificar las aplicaciones industriales de mayor importancia basadas en catalizadores homogéneos.

Aplicar los conceptos de química organometálica al diseño de catalizadores homogéneos.

Proponer las etapas fundamentales que integran el mecanismo de las reacciones catalíticas homogéneas.

Evaluar la actividad y selectividad de los catalizadores, y la sostenibilidad de los procesos catalíticos.

2.2. Resultados de aprendizaje

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

Comprensión de las reacciones fundamentales en catálisis homogénea.

Conoce las reacciones catalíticas homogéneas catalizadas por complejos de metales de transición, sus mecanismos de reacción y sus aplicaciones industriales.

Elige el catalizador homogéneo más adecuado para un proceso sintético.

Propone el ciclo catalítico operativo en la preparación de un producto.

Elabora, expone y defiende trabajos tutelados básicos de catálisis homogénea.

2.3. Importancia de los resultados de aprendizaje

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. Evaluación

3.1. Tipo de pruebas y su valor sobre la nota final y criterios de evaluación para cada prueba

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

Evaluación continua

1.- Se realizarán dos pruebas de evaluación continua, que consistirán en preguntas de tipo test y preguntas de respuesta corta. En la primera prueba se evaluarán los temas 1 a 5 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 dos controles de problemas, que consistirán en ejercicios similares a los propuestos en los seminarios. La nota de los controles de problemas se promediará y el resultado 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 tipo test, de preguntas de respuesta corta y de preguntas tipo ensayo. Para aprobar será necesario alcanzar una calificación mínima de 5 puntos (sobre 10).

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 Grado](#) 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>

4. Metodología, actividades de aprendizaje, programa y recursos

4.1. Presentación metodológica general

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

1. Clases teóricas (4 ECTS).
2. Resolución de problemas y seminarios (1 ECTS).

Las actividades 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 dispongan realizarlas de forma telemática.

4.2. Actividades de aprendizaje

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

- 1.- 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.

4.3. Programa

El programa teórico de la asignatura comprende los siguientes temas:

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 Fundamentales en Catálisis Homogénea

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.

Reacciones Catalíticas Homogeneas: Aplicaciones

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: catalizador de Wilkinson, catalizadores catiónicos de rodio e iridio; hidrogenación asimétrica; catalizadores de rutenio; hidrogenación asimétrica, otros catalizadores. 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

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

Polimerización y oligomerización.

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

Metátesis

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. Preparación de adiponitrilo por hidrocianación de butadieno. 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.

4.4. Planificación de las actividades de aprendizaje y calendario de fechas clave

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Los horarios de la asignatura y fechas oficiales de exámenes se publican en el tablón de anuncios y en página web de la Facultad de Ciencias: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>.

Las fechas de las pruebas de evaluación se expondrán con la debida antelación en el tablón de anuncios del Departamento de Química Inorgánica y en el ADD.

4.5. Bibliografía y recursos recomendados

<http://psfunizar10.unizar.es/br13/egAsignaturas.php?codigo=27232>