



Máster en Química Molecular y Catálisis Homogénea 60452 - Catálisis

Guía docente para el curso 2014 - 2015

Curso: 1, Semestre: 1, Créditos: 6.0

Información básica

Profesores

- **Ricardo Castarlenas Chela** rcastar@unizar.es
- **Francisco José Fernández Álvarez** paco@unizar.es
- **María Cristina García Yebra** cgaryeb@unizar.es
- **Jesús Julián Pérez Torrente** perez@unizar.es
- **Fernando Viguri Rojo** fviguri@unizar.es
- **Raquel Pérez Herrera** raquelph@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda el dominio de los conceptos básicos de enlace, estructura y reactividad de compuestos orgánicos e inorgánicos. La asistencia a clase y el trabajo continuado facilita la superación de la asignatura.

Actividades y fechas clave de la asignatura

La asignatura *Catálisis* se cursará durante el primer semestre, al igual que las otras 3 asignaturas obligatorias del Máster y las optativas *Metodologías fundamentales de síntesis* y *Recursos bibliográficos y bases de datos*. A lo largo del curso se realizarán controles y trabajos de forma individual o en grupos pequeños. Las fechas de realización y presentación de los mismos se comunicarán con suficiente antelación.

Las prácticas de la asignatura *Catálisis*, junto a las de las asignaturas del Módulo *Química Molecular y Catálisis*, constituyen un bloque integrado. Las sesiones de laboratorio se realizarán en la segunda parte del cuatrimestre en horario y lugar que se anunciarán con la suficiente antelación.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

- 1:** Identificar la importancia de la catálisis en el desarrollo de procesos y productos químicos de modo sostenible.
- 2:** Conocer los diferentes tipos de catalizadores, su modo de acción, ventajas e inconvenientes, así como sus principales aplicaciones.
- 3:** Evaluar la actividad, selectividad e impacto ambiental de los procesos catalíticos.
- 4:** Identificar las reacciones fundamentales en catálisis organometálica.
- 5:** Conocer las principales reacciones homogéneas catalizadas por complejos de metales de transición y sus mecanismos de reacción.
- 6:** Describir los diferentes tipos de catalizadores heterogéneos así como las diferentes estrategias de inmovilización de catalizadores moleculares.
- 7:** Describir los diferentes tipos de reacciones homogéneas organocatalizadas y sus aplicaciones.
- 8:** Identificar las líneas de investigación actuales en catálisis y su contribución al desarrollo científico y tecnológico.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

La asignatura se centra en el estudio de los conceptos básicos de catálisis, los diferentes tipos de catalizadores, el mecanismo de acción y sus aplicaciones. La asignatura está dividida en varios bloques diferenciados en los que se aborda: i) las reacciones fundamentales, mecanismos y aplicaciones de catalizadores organometálicos que operan en fase homogénea, ii) los principios, clasificación y aplicaciones de catalizadores heterogéneos, iii) el diseño y mecanismo de acción de organocatalizadores. Por último, se presenta una selección de algunas de las líneas de investigación de vanguardia en catálisis y su potencial para afrontar los nuevos retos para un desarrollo sostenible.

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 proporcionar al alumno una formación avanzada en Catálisis relacionada con los principios, mecanismos y aplicaciones de los diferentes tipos de catalizadores que operan tanto en fase homogénea, catalizadores organometálicos y organocatalizadores, como en fase heterogénea.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura de Catálisis se enmarca dentro de Módulo obligatorio *Química Molecular y Catálisis*. Es una asignatura de carácter obligatorio que se imparte durante el primer semestre del curso y tiene una carga lectiva de 6 créditos ECTS. La asignatura proporciona una formación avanzada que permite comprender los principios básicos en el diseño de catalizadores para transformaciones sintéticas de un modo eficiente y selectivo. El desarrollo y optimización de

catalizadores es uno de los objetivos prioritarios de muchos de los grupos de investigación del ISQCH, y por lo tanto, se trata de una asignatura fundamental que debe posibilitar la realización de Trabajos fin de Máster en esta temática de investigación.

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

- 1:** Aplicar los conocimientos adquiridos para abordar el estudio de nuevas transformaciones catalíticas dentro de un contexto de investigación.
- 2:** Aplicar conceptos de química inorgánica, orgánica y organometálica, al diseño de catalizadores.
- 3:** Trasladar los principios de la catálisis a la preparación de productos químicos a escala de laboratorio observando las normas de sostenibilidad y el respeto ambiental.
- 4:** Identificar y utilizar las fuentes bibliográficas más habituales en catálisis en un contexto de investigación.
- 5:** Valorar el potencial de la catálisis para afrontar los nuevos retos para un desarrollo sostenible.
- 6:** Comunicar las conclusiones de un estudio de investigación en el campo de la catálisis.

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

Los conocimientos adquiridos en la asignatura deben proporcionar al alumno una visión global de la importancia de la investigación en catálisis, las principales líneas de investigación y la contextualización de las mismas dentro del panorama general de los procesos catalíticos. El diseño de catalizadores, su evaluación y optimización, son claves en el desarrollo de procesos químicos sostenibles ya que permite la utilización eficiente de recursos naturales escasos, la reducción de residuos y la utilización eficaz de la energía.

Evaluación

Actividades de evaluación

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

- 1:**
 - 1.- Controles de resolución de problemas, cuestiones teórico-prácticas y actividades relacionadas (15 %).
 - 2.- La realización de forma individual o en grupo de un trabajo dirigido basado en un artículo científico relacionado con los contenidos de la asignatura (15 %).
 - 3.- Prueba escrita a realizar en el periodo de evaluación global consistente en la resolución de problemas y cuestiones (70 %).
- 2:**

La calificación final será la mejor de las siguientes notas:

$$\text{NOTA 1} = 0,15 \times \text{nota de controles} + 0,15 \times \text{nota del trabajo presentado} + 0,70 \times \text{nota prueba escrita global.}^*$$
$$\text{NOTA 2} = \text{nota prueba escrita global.}^*$$

* La prueba escrita global incluirá cuestiones relacionadas con las prácticas.

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:

Clases teóricas (4 ECTS)

Resolución de problemas y seminarios (1.5 ECTS)

Prácticas de Laboratorio (0.5 ECTS)

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:** Actividad formativa de adquisición de conocimientos avanzados de Catálisis. Esta actividad comprende 40 horas presenciales de clases expositivas-interactivas en grupo grande.
- 2:** Actividad formativa de clases de resolución de problemas y seminarios. Esta actividad comprende 15 horas de clases presenciales en las que los alumnos, de forma individual o en grupo, resolverán casos prácticos.
- 3:** Tutorías. Los alumnos dispondrán de 3 horas semanales para tutorías individualizadas.
- 4:** Prácticas de laboratorio. Esta actividad comprende 5 horas y son obligatorias. Las prácticas de la asignatura, junto a las asignaturas del Módulo *Química Molecular y Catálisis*, constituyen un bloque integrado en el que se abordará: i) la síntesis de una molécula orgánica con la capacidad para actuar como ligando, ii) la preparación de un compuesto organometálico y/o de coordinación y iii) el estudio de su actividad catalítica.
- 5:** El programa teórico de la asignatura consta de los siguientes bloques temáticos:

Conceptos básicos de catálisis.

Catálisis: conceptos generales. Catálisis y química verde. Tipos de catalizadores: catalizadores homogéneos, heterogéneos y biocatalizadores. Catálisis homogénea: catálisis ácido-base, catálisis organometálica, organocatálisis. Actividad y selectividad de los catalizadores. Cuantificación del impacto medioambiental. Importancia económica de la catálisis.

Catálisis organometálica.

Diseño y modo de acción de los catalizadores organometálicos. Ligandos y diseño de catalizadores. Mecanismos de reacción: aspectos termodinámicos y cinéticos. Reacciones fundamentales: sustitución, adición, eliminación, inserción, ataque nucleófilo. Reacciones catalíticas en fase homogénea: hidrogenación y transferencia de hidrógeno, hidrofuncionalización, carbonilación, funcionalización C-H, reacciones de acoplamiento C-C, metátesis de alquenos, polimerización y oligomerización de olefinas. Procesos de catálisis homogénea de interés industrial.

Catálisis heterogénea.

Principios y conceptos de la catálisis heterogénea. Clasificación de los catalizadores heterogéneos en función de la estructura y composición. Catalizadores soportados. Estrategias de inmovilización: interacciones de tipo covalente y no covalente. Inmovilización no-covalente: adsorción, interacción electrostática, enlaces de hidrógeno, encapsulación. Nanocatálisis. Procesos de catálisis heterogénea de interés industrial y medioambiental.

Organocatálisis.

Introducción a la organocatálisis asimétrica. Modo de activación de los organocatalizadores: formación de enlaces covalentes, formación de enlaces de hidrógeno, interacciones débiles, catalizadores de transferencia de fase. Mecanismos de acción y ejemplos representativos.

Catálisis en la Frontera.

Activación/funcionalización de CO₂. Catálisis bioinspirada. Catalizadores moleculares para la oxidación de agua. Dendrímeros y su aplicación en catálisis. Procesos multi-step: catalizadores multifuncionales y catálisis dual.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Los horarios de la asignatura y fechas de exámenes se publican 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.

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.- Catalysis: Concepts and Green Applications. G. Rothenberg. Ed. Wiley-VCH, 2008.
- 2.- Organotransition Metal Chemistry: From Bonding to Catalysis. J. Hartwig. Ed. Science Books, 2012.
- 3.- Fundamentos y Aplicaciones de la Catálisis Homogénea. L. A. Oro, E. Sola. Ed. Publicaciones de la Universidad de Zaragoza, 2000.
- 4.- Homogeneous Catalysis: Understanding the Art. P. W.N.M. van Leeuwen. Ed. Kluwer Academic Publishers, 2004.
- 5.- Heterogeneous Catalysis: Fundamentals and Applications. J. R. H. Ross. Ed. Elsevier, 2012.
- 6.- Asymmetric Organocatalysis. A. Berkessel, H. Gröger. Ed. Wiley-VCH, 2005.

Bibliografía Complementaria

- 1.- Green Chemistry and Catalysis. R. A. Sheldon, I. Arends, U. Hanefeld. Ed. Wiley-VCH, 2007.
- 2.- Applied Homogeneous Catalysis. A. Behr, P. Neubert. Ed. Wiley-VCH, 2012.
- 3.- Metal-Catalysis in Industrial Organic Processes. G. P. Chiusoli, P. M. Maitlis. The Royal Society of Chemistry, 2006.
- 4.- Industrial Catalysis: A Practical Approach (2ª edición). J. Hagen. Ed. Wiley-VCH, 2006.
- 5.- Heterogenized Homogeneous Catalysts for Fine Chemicals Production: Materials and Processes. P. Barbaro, F. Liguori. Ed. Springer, 2010.
- 6.- Nanomaterials in Catalysis. P. Serp, K. Philippot. Ed. Wiley-VCH, 2013.

7.- Comprehensive Enantioselective Organocatalysis. P. I. Dalko. Ed. Wiley-VCH, 2013.

8.- Enantioselective Organocatalysis. P. I. Dalko. Ed. Wiley-VCH, 2007.

9.- Hydrogen Bonding in Organic Synthesis. P. M. Pihko. Ed. Wiley-VCH, 2009.

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada