

## GRADO EN QUÍMICA

### DATOS DE LA ASIGNATURA

ASIGNATURA	INTRODUCCIÓN A LA CATÁLISIS HOMOGÉNEA	CÓDIGO	757509308
MÓDULO	COMPLEMENTARIO	MATERIA	Q. INORGÁNICA
CURSO	4 <sup>º</sup>	CUATRIMESTRE	1 <sup>º</sup>
DEPARTAMENTO	QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN	ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA INORGÁNICA
CARÁCTER	OPTATIVA	CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

### DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS

	TOTAL	TEÓRICOS GRUPO GRANDE	TEÓRICOS GRUPO REDUCIDO	PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA	PRÁCTICAS DE LABORATORIO	PRÁCTICAS DE CAMPO
ECTS	3	1.26	0.74	0	1	0

### DATOS DEL PROFESORADO

#### COORDINADOR

NOMBRE ANA CABALLERO BEVIA

DEPARTAMENTO QUÍMICA PROFESOR JOSÉ CARLOS VÍLCHEZ MARTÍN

ÁREA DE CONOCIMIENTO QUÍMICA INORGÁNICA

UBICACIÓN CIQSO 2.08

CORREO ELECTRÓNICO ana.caballero@dqcm.uhu.es

TELÉFONO 959219952

URL WEB

CAMPUS VIRTUAL MOODLE

### HORARIO DE TUTORÍAS

PRIMER SEMESTRE				
LUNES	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
	17:00 - 19:00	17:00 - 19:00	17:00 - 19:00	
SEGUNDO SEMESTRE				
LUNES	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
	17:00 - 19:00	17:00 - 19:00	17:00 - 19:00	

### DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA ASIGNATURA

#### DESCRIPCIÓN GENERAL

Esta asignatura optativa se imparte en el cuarto curso de la titulación. La asignatura proporciona herramientas básicas para los estudiantes que deseen introducirse en el ámbito de la catálisis. Fundamentalmente proporciona conocimientos de cómo actúa un catalizador, su importancia en investigación y en la industria y algunos ejemplos de reacciones catalíticas sostenibles con el medio ambiente.

### ABSTRACT

The optional subject of Introduction to Homogeneous Catalysis is part of the fourth year of Chemistry Degree. It aims to provide the student with the basic knowledge of Catalysis, as well as to understand the importance in the fields of research and industry.

### OBJETIVOS: RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Esta asignatura proporciona al alumno un conocimiento más amplio sobre los principios generales de la catálisis y sobre los mecanismos de las reacciones catalíticas en fase homogénea, subrayando la importancia del conocimiento de la estructura y naturaleza del catalizador como base para mejorar las características del proceso catalítico

### REPERCUSIÓN EN EL PERFIL PROFESIONAL

Dado el papel que actualmente juega la catálisis en el desarrollo de procesos químicos más limpios y respetuosos con el medioambiente, esta asignatura constituye un complemento importante para el alumno del Grado de Química

### RECOMENDACIONES AL ALUMNADO

Es conveniente (aunque no obligatorio) haber cursado y aprobado las asignaturas de primer y segundo curso de Química Inorgánica, Química Orgánica así como la Química Cuántica.

### COMPETENCIAS

#### COMPETENCIAS BÁSICAS

CB1 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

B1 - Capacidad de análisis y síntesis.

B2 - Capacidad de organización y planificación.

B3 - Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.

B4 - Conocimiento de una lengua extranjera.

B5 - Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/conocimiento.

B6 - Resolución de problemas.

B7 - Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.

B8 - Trabajo en equipo.

B9 - Razonamiento crítico.

B10 - Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.

B11 - Sensibilidad hacia temas medioambientales.

B12 - Compromiso ético.

### COMPETENCIAS GENERALES

CG1 - Que los estudiantes hayan desarrollado y demostrado poseer habilidades de aprendizaje y conocimientos procedentes de su campo de estudio, siendo capaces de aplicarlos en su trabajo, interpretando datos relevantes para emitir juicios de temas de diversa índole pudiendo transmitirlos a un público tanto especializado como no especializado.

### COMPETENCIAS TRANSVERSALES

### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

C6 - Conocer los principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.

C14 - Conocer la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.

C15 - Conocer la estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos.

C16 - Conocer las técnicas instrumentales y sus aplicaciones.

C17 - Conocer las operaciones unitarias de Ingeniería Química.

C18 - Conocer la metrología de los procesos químicos incluyendo la gestión de calidad.

C19 - Capacidad para organizar, dirigir y ejecutar tareas del laboratorio químico y de producción en instalaciones industriales complejas donde se desarrollen procesos químicos. Asimismo, para diseñar la metodología de trabajo a utilizar.

Q1 - Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la química.

Q2 - Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

Q3 - Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.

Q4 - Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico y profesional.

Q5 - Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.

Q6 - Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.

P1 - Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.

P2 - Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.

P3 - Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.

P4 - Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para estudios estructurales y separaciones.

P5 - Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

P6 - Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.

### TEMARIO Y DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

#### TEORÍA

#### Tema 1. Conceptos básicos y definiciones.

- 1.1 Desarrollo sostenible. Química verde
- 1.2 Catalizador
- 1.3 Aspectos energéticos de una reacción
- 1.4 Ciclos catalíticos

- 1.5 Propiedades de los catalizadores
- 1.6 Selectividad de una reacción
- Quimioselectividad, regioselectividad y enantioselectividad
  - 1.7 Clasificación de los catalizadores
  - 1.8 Catálisis homogénea y catálisis heterogénea
  - 1.9 La catálisis y la industria química
- Economía atómica, factor E y selectividad atómica

### **Tema 2. Reacciones de hidrogenación.**

- 2.1 Activación de hidrógeno molecular
- 2.2 Hidrogenación catalítica
  - 2.2.1 El catalizador de Wilkinson
  - 2.2.2. El catalizador de Schrock-Osborn
- 2.3 Mecanismo de hidrogenación
- 2.4 Catalizadores de rutenio: rotura heterolítica de hidrógeno
- 2.5 Productos homquirales
- 2.6 Síntesis asimétrica
- 2.7 Catálisis asimétrica
  - 2.7.1. Ligandos quirales
- 2.8 Hidrogenación asimétrica de olefinas
  - 2.8.1. Ligandos quirales
- 2.9 Hidrogenación asimétrica por transferencia de hidrógeno

### **Tema 3. Reacciones de carbonilación.**

- 3.1 Reacciones de homologación
- 3.2 Reacciones de carbonilación
  - 3.2.1 Monóxido de carbono
  - 3.2.2 Carbonilaciones homogéneas
- 3.3 Ácido acético
  - 3.3.1 El proceso Monsanto
  - 3.3.2 El proceso Cativa
- 3.4 Anhídrido acético
- 3.5 Reacciones de hidroformilación
  - 3.5.1 Hidroformilación del propeno
  - 3.5.2 Química fina
  - 3.5.3 Ligandos
  - 3.5.4 Hidroformilación asimétrica
  - 3.5.6 Reacciones relacionadas
  - 3.5.6 Hidrocarboxilación
- 3.6 Copolimerización de CO y olefinas

### **Tema 4. Reacciones de polimerización de olefinas.**

- 4.1 Polímeros: generalidades
- 4.2 Tipos de polimerización
- 4.3 Polimerización con metales de transición
  - 4.3.1 Ziegler-Natta
  - 4.3.2 Catalizadores solubles del grupo 4

- 4.3.3 Catalizadores solubles del grupo 8
- 4.3.4 Catalizadores solubles de Fe y Co
- 4.3.5 Polimerización radicalaria por transferencia de átomo

### Tema 5. Metátesis de olefinas.

- 5.1 Metátesis de olefinas: generalidades.
- 5.2 Complejos carbeno metálicos.
- 5.3 Mecanismo de la reacción de metátesis de olefinas.
- 5.4 Tipos de metátesis de olefinas. Ejemplos.
- 5.5 Aplicaciones de la metátesis de olefinas.
- 5.6 Metátesis de eninos. Aplicaciones.
- 5.7 Metátesis de alquinos.

### Tema 6. Activación de enlaces C-H poco reactivos.

- 6.1 Introducción
- 6.2 Activación mediante metales de transición

#### 6.2.1. El caso del metano

- 6.3 Funcionalización catalítica mediante metales de transición.

#### 6.3.1 Metano como sustrato

- 6.4 Alternativa: funcionalización a través de ligandos

#### 6.4.1. Carbenos

#### 6.4.2. Nitrenos

#### 6.4.3. Oxo

### Tema 7. Reacciones de acoplamiento cruzado

## PRÁCTICAS DE LABORATORIO

### 1.- Reacción de Hidrogenación.

### 2.- Reacción de metátesis de olefinas.

## METODOLOGÍA DOCENTE

Grupo grande

- Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.
- Seminarios y conferencias sobre temas específicos de los contenidos propios de la asignatura, presentación de material de video y multimedia para ilustrar temas del programa teórico.
- Discusión de artículos científicos.
- Resolución de dudas.

Prácticas de laboratorio

- Prácticas de laboratorio con grupos reducidos manejo de técnicas experimentales, discusión de resultados, obtención de conclusiones, presentación de una memoria final.

## CRONOGRAMA ORIENTATIVO

SEMANAS (S):	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
GRUPO GRANDE							T1	T2	AAD1	T3	AAD2	T4	T5	T6	T7
GRUPO REDUCIDO															
PRÁCTICAS DE LABORATORIO									2 DIAS						
PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA															
PRÁCTICAS DE CAMPO															

## EVALUACIÓN DE LA ASIGNATURA

### PRIMERA EVALUACIÓN ORDINARIA (FEBRERO/JUNIO)

**EVALUACIÓN CONTINUA** **PORCENTAJE** 25 %

Calificación obtenida por la realización y/o exposición de trabajos realizados (bibliográficos, problemas, cuestiones), individualmente o en equipo y otras actividades académicas dirigidas. Supondrá un 25% de la calificación total de la asignatura

Existe opción alternativa a la evaluación continua arriba contemplada **NO**

**EVALUACIÓN FINAL** **PORCENTAJE** 75 %

Las capacidades adquiridas en cada unidad temática se evaluarán conjuntamente con las distintas actividades de la asignatura, es decir, con las calificaciones de la docencia teórica, práctica y de las actividades académicas dirigidas, lo que permite tener una evaluación continua del alumno. Representando 75 % de la calificación total de la asignatura

¿Contempla una evaluación parcial voluntaria? **NO**

### SEGUNDA EVALUACIÓN ORDINARIA (SEPTIEMBRE) Y OTRAS EVALUACIONES

Se realizará un examen final que corresponderá al 75%. El 25% restante se contabilizará a partir de los resultados obtenidos en las actividades y trabajos realizados durante el curso. En el caso de la inexistencia de los mismos, el alumno deberá entregar una relación de actividades resueltas para su evaluación de carácter similar a las realizadas durante el curso y realizar un examen práctico en el laboratorio.

### OTROS CRITERIOS DE EVALUACIÓN

¿Contempla la posibilidad de subir nota una vez realizadas las pruebas? **NO**

**Requisitos para la concesión de matrícula de honor**

Se podrá asignar MH a aquel alumno que obtenga la máxima calificación global en los diferentes trabajos y actividades realizadas durante el curso, siempre que supere un 9.0.

## REFERENCIAS

### BÁSICAS

- G. W. Parshall, S. D. Ittel, "Homogeneous Catalysis", Second Edition, Willey & Sons, 1992.
- B. G. Gates, "Catalytic Chemistry" Willey & Sons.
- P. Powell, "Principles of Organometallic Chemistry", Second Edition, Chapman & Hall, 1988.
- R. H. Crabtree "The Organometallic Chemistry of the Transition Metals", Willey & Sons.

### ESPECÍFICAS



# Grado en QUÍMICA

Curso 2017/2018



OTROS RECURSOS