



# **GUÍA DOCENTE**

## **SJH011 - Catálisis Inmovilizada**

**Curso académico 2020/2021**

**Titulación: Máster Universitario en Química Sostenible (Plan de 2020)**

# 1. Información general de la asignatura

**Departamento:** Dep. de Química Inorgánica y Orgánica

**Área de conocimiento:** Química Orgánica

**Carácter:** Optativa

**Semestre:** Anual

**Créditos:** 3

**Idiomas en los que se imparte la asignatura:** Consultar [SIA](#)

**Profesor responsable:** Belén Altava Benito

Para consultar el listado de profesores que imparte la asignatura hay que consultar el [SIA](#).

**Horarios:** Consultar apartado de horarios en la [web del estudio](#)

## 2. Justificación

La asignatura engloba uno de los principios de la Química Verde, el empleo de catalizadores en síntesis orgánica, en este caso el uso de catalizadores soportados (reacciones en fase heterogénea). Esta asignatura forma parte del bloque de Catálisis presente en el master. Formando parte del mismo se encuentra, la Catálisis Homogénea, Catálisis Heterogénea y la Biocatálisis.

## 3. Conocimientos previos recomendables

Se recomienda tener conocimientos básicos en síntesis orgánica y determinación estructural de compuestos orgánicos.

## 4. Competencias y resultados de aprendizaje

### Competencias genéricas y específicas

CB10 - Que los estudiantes posean habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CG01 - Conocer los principios de la química e ingeniería sostenibles y tener una visión de los avances históricos que han dado lugar al desarrollo de la química verde y otros principios asociados así como los protocolos que permiten su evaluación y aplicación en casos reales.

- E1 - Aplicar los principios de la química sostenible a la implementación en la práctica de los procesos químicos industriales.
- E2 - Demostrar las ventajas y desventajas de cada una de las denominadas tecnologías sostenibles en el campo de la Química.
- E3 - Relacionar la toxicidad/peligro como una propiedad física/estructural que puede ser diseñada y manipulada.
- E4 - Valorar adecuadamente ejemplos de procesos industriales donde se cumplen los principios de la química sostenible.
- E5 - Utilizar las tendencias actuales de la Química Verde para poder realizar un análisis crítico sobre el grado de cumplimiento de los postulados de la Química Sostenible en un determinado proceso industrial.
- G1 - Integrar los principios teóricos de la sostenibilidad en un caso experimental concreto.
- G2 - Capacidad de organización, comprensión, análisis y síntesis oral y escrita en el ámbito de la química sostenible en la investigación y los procesos industriales.
- G3 - Aplicar las herramientas de la química sostenible en la obtención de compuestos de interés en la industria química.
- G4 - Participar en proyectos encaminados a la mejora de procesos productivos o de manipulación de productos químicos.

### Resultados de aprendizaje

- CI\_01\_ Conocer las características generales de los reactivos soportados
- CI\_02\_ Conocer las distintas técnicas de caracterización de polímeros
- CI\_03\_ Conocer las ventajas e inconvenientes desde un punto de vista medioambiental del empleo de reactivos y catalizadores soportados
- CI\_04\_ Conocer el concepto de scavenger y su aplicación en una determinada reacción
- CI\_05\_ Realizar síntesis orgánicas sobre soportes poliméricos
- CI\_06\_ Utilizar reactivos y catalizadores soportados en Química Orgánica
- CI\_07\_ Conocer como realizar separaciones mediante el empleo de reactivos soportados como fases estacionarias
- CI\_08\_ Saber buscar, seleccionar y valorar la información
- CI\_09\_ Definir las herramientas de la Química Sostenible en el area de la Catálisis Inmovilizada

## 5. Contenidos

Características generales de los reactivos soportados. Metodología general de trabajo. Caracterización de Polímeros. Ventajas e inconvenientes desde un punto de vista medioambiental del empleo de reactivos y catalizadores soportados. Empleo de reactivos soportados como "scavengers". Síntesis orgánicas sobre soportes poliméricos. Reactivos soportados en Química Orgánica. Catalizadores soportados. Separaciones mediante el empleo de reactivos soportados. Aplicaciones industriales y perspectivas.

## 6. Temario

### *BLOQUE 1 Tipos de Soportes y metodología general de trabajo*

1. Características generales de los reactivos soportados.
  - 1.1 Tipos de soportes
2. Metodología general de trabajo.

## 2.1 Funcionalización de polímeros

## 2.2 Linkers

### *BLOQUE 2 Caracterización de Polímeros*

## 3. Caracterización de Polímeros y Funcionalización de Polímeros

### 3.1 <sup>1</sup>H RMN y <sup>13</sup>C RMN

### 3.2 FT-IR-RAMAN

### 3.3 Porosimetría

### 3.4 Análisis óptico y colorimétrico

### 3.5 otros

4. Ventajas e inconvenientes desde un punto de vista medioambiental del empleo de reactivos y catalizadores soportados.

5 Síntesis orgánica sobre soportes poliméricos.

5.1 Principales Transformaciones Orgánicas sobre polímeros

5.2 Síntesis en fase sólida (síntesis de péptidos, proteínas, oligonucleótidos....)

### *BLOQUE 3 Aplicaciones*

6 Empleo de reactivos soportados como "scavengers".

7 Reactivos soportados en Química Orgánica.

7.1 Reactivos soportados no quirales

7.2 Reactivos soportados quirales

7.3 Aplicaciones en flujo continuo

8 Catalizadores soportados.

8.1 Catalizadores soportados no quirales

8.2 Catalizadores soportados quirales

8.3 Aplicaciones en flujo continuo

9 Separaciones mediante el empleo de reactivos soportados.

10 Aplicaciones industriales y perspectivas.

## **7. Bibliografía**

### **7.1. Bibliografía básica**

**1.- *Syntheses and Separations using Functional Polymers*. D.C. Sherrington and P. Hodge. John Wiley and Sons. 1988**

- 2.- *Solid Supports and Catalysits in Organic Synthesis*. K. Smith. **1992**
- 3.- *Solid-Supported Combinatorial and Parallel Synthesis of Small-Molecular-Weight Compounds Libraries*. D. Obrecht and J.M. Villalgorido. Elsevier Science Ltd. **1998**
- 4.- *Solid-Phase Organic Synthesis*. K. Burgess. John Wiley and Sons. **2000**
- 5.- *Solid Phase Sythesis and Combinatorial Technologies*. P Seneci. John Wiley and Sons. **2000**
- 6.- *Polymer Analysis*. Barbara Stuart. John Wiley and Sons. **2002**
- 7.- *Organic Synthesis on Solid Phase*. F. Zaragoza Dörwald, Wiley-VCH, **2003**.
- 8.- *Polymeric Materials in Organic Synthesis and Catalysis*. Michael R. Buchmeiser. Wiley-VCH, **2003**
- 9.- Kirschning, A., Jas U, Kunz G. *Chemistry in flow-new continuous flow reactors in organic synthesis*, in: R. Epton (Ed.), *Innovation and Perspectives in Solid Phase Synthesis and Combinatorial Libraries*, MPG Books Ltd., **2004**
- 10.- *The Power of Functional Resin in Organic Synthesis*, Wiley-VCH, **2008**.

## 7.2. Bibliografía complementaria

- 1.- Model Rigid Monolithic Porous Polymers: An Inexpensive, Efficient, and Versatile Alternative to Beads for Design of Materials for Numerous Applications. F. Svec, J.M.J. Fréchet, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **1999**, 38, 34-48
- 2.- Preparation, structure and morphology of polymer supports. D.C. Sherrington, *Chem. Commun.*, **1998**, 2275-2286.
- 3.- Functionalised Polymers: Recent Developments and New Applicatios in Synthetic Organic Chemistry. S. J. Shuttleworth, S. M. Allin, P. K. Sharma, *Synthesis*, **1997**, 1217-1238

### Recent

- 4.- Recent developments in asymmetric catalysis using synthetic polymers with main chain chirality, Pu Lin, *Tetrahedron: Asymmetry*, Vol. 9, **1998**, 1457-1477.
- 5.- Supported Reagent and Catalysts, and Sorbents: Evolution and exploitation-A Personel View. D.C. Sherrington, *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.*, **2001**, 39, 2364-2377.
- 6.- Polymer-supported catalysis in synthetic organic chemistry, B. Clapham, T. S. Reger and K. D. Janda, *Tetrahedron*, Vol. 57, **2001**, 4637-4662
- 7.- Grafted Macroporous Polymer Monolithic Disks: A New Format of Scavengers for Solution-Phase Combinatorial Chemistry, Tripp, J. A.; Svec, F.; Frechet, J. M. J.; *J. Comb. Chem.*; **2001**; 3(2); 216-223.
- 8.- Recoverable Catalysts and Reagents Using Recyclable Polystyrene-Based Supports. McNamara, C. A.; >Dixon, M. J.; Bradley, M.; *Chem. Rev.*; **2002**; 102(10); 3275-3300.
- 9.- Preparation of Polymer-Supported Ligands and Metal Complexes for Use in Catalysis. Leadbeater, N. E.; Marco, M.; *Chem. Rev.*; **2002**; 102(10); 3217-3274
- 10.- Organic synthesis using polymer-supported reagents, catalysts and scavengers in simple laboratory flow systems. P. Hodge, *Current Opinion in Chemical Biology* **2003**, 7, 362-373

- 11.- Solid Phase Reaction Monitoring-Chemical Derivatization and Off-Bead Analysis. C. Kay, O.E. Lorthois, N.J. Parr, M. Congreve, S.C. McKeown, J.J. Scicinski, S.V. Ley, *Biothecnology and Bioengineering (Combinatorial Chemistry)*, 71, 2, **2001**, 110-118.
- 12.- Monitoring the Process and the yield of Solid-Phase Organic Reactions Directly on Resin Supports. D. Yan, *Acc. Chem. Res.*, **1998**, 31, 621-630.
- 13.- The use of NIR-FT-Raman spectroscopy for the characterization of polymer-supported reagents and catalysts, B. Altava, M. I. Burguete, E. García-Verdugo, S. V. Luis and M. J. Vicent. *Tetrahedron*, Vol. 57, **2001**, 8675-8683
- 14.- Polymer-supported organic reaction: what takes place in the beads?. P. Hodge, *Chem. Soc. Rev.*  
VOL 26, **1997**, 417-424
- 15.- Recent Advances in Asymmetric C-C and C-Heteroatom Bond Forming Reactions using Polymer-Bound Catalysts, S. Bräse, F.Lauterwasser, R. E. Ziegert, *Adv. Synth. Catal.* **2003**, 345, 869-929
- 16.- Recoverable Catalysts for Asymmetric Organic Synthesis. Q. H. Fan, Y. M. Li, A. C. Chang, *Chem. Rev.* **2002**, 102, 3385-3466
- 17.- Chemistry in Interphases-A New Approach to Organometallic Synthesis and Catalysis, E. Lindner, T. Schneller, F. Auer, H. A. Mayer, *Angew Chem. Int. Ed.* **1999**, 38, 2154-74
- 18.- Macroporous copolymer networks, O. Okay, *Prog. Polym. Sci.* 25, **2000**, 711-779
- 19.- Functionalized Polymers-Emerging Versatile Tools for Solution-Phase Chemistry and Automated Parallel Synthesis, A. Kirschning, H. Monenschein, R. Wit2tenberg, *Angew Chem. Int. Ed.* **2001**, 40, 650-679
- 20.- P. Hodge, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2005**, 44, 8542-8553
- 21.- Performing the Synthesis of a Complex Molecule on Sequentially Linked Columns: Toward the Development of a "Synthesis Machine" Stefan France, Daniel Bernstein, Anthony Weatherwax, and Thomas Lectka, *Org. Lett.*, Vol. 7, No. 14, **2005**
- 22.- Multi-Step Application of Immobilized Reagents and Scavengers: A Total Synthesis of Epothilone C, Steven V.Ley et. al., *Chem. Eur. J.* **2004**, 10, 2529 ± 2547
- 23.- P. McMorn, G. J. Hutchings, *Chem. Rev.* **2004**, 33, 108-122.
- 24.- P. Toy and M. Shi Polymer-Supported Reagents and Catalysts: Increasingly Important Tools for Organic Synthesis *Tetrahedron*, **2005**, 61, 12026-12192
- 25.- [Immobilization of organic catalysts: When, why, and how](#), Cozzi F, *Advanced Synthesis & Catalysis*, 348 (12-13): 1367-1390, **2006**
- 26.- [Aspects of immobilisation of catalysts on polymeric supports](#). Dioso BML, Vankelecom IFJ, Jacobs PA, *Advanced Synthesis & Catalysis*, 348 (12-13): 1413-1446, **2006**
- 27.- [Liquid/liquid biphasic recovery/reuse of soluble polymier-supported catalysts](#). Bergbreiter DE, Sung SD, *Advanced Synthesis & Catalysis*, 348 (12-13): 1352-1366, **2006**
- 28.- Svec F, [Csaba Horvath's contribution to the theory and practice of capillary electrochromatography](#), *Journal of Separation Science*, 27 (15-16): 1255-1272, **2004**
- 29.- [Font D](#), [Bastero A](#), [Sayalero S](#), [Jimeno C](#), [Pericas MA](#). Highly enantioselective alpha-aminoxylation of aldehydes and ketones with a polymer-supported organocatalyst. *Organic Letters*,

9, 1943-1946, **2007**

30. Pericas, MA. [Fast and enantioselective production of 1-aryl-1-propanols through a single pass, continuous flow process](#), *Advanced Synthesis & Catalysis*, 350, 927, **2008**

31.- [Mason BP](#) , [Price KE](#) , [Steinbacher JL](#) , [Bogdan AR](#) , [McQuade DT](#) , Greener approaches to organic synthesis using microreactor technology, *Chemical Reviews*, 107, 2300-2318, **2007**

32. Title: [First example of organocatalysis by polystyrene-supported PAMAM dendrimers: Highly efficient and reusable catalyst for Knoevenagel condensations](#)

Author(s): Krishnan, GR; Sreekumar, *European Journal Of Organic Chemistry*, 28, 4763-4768, **2008**

33.- Organic Polymer Supports for Synthesis and for Reagent and Catalyst Immobilization, Toy P.H., Lu, J., *Chem. Rev.*, ASAP article.

34.- Rational Approach to Polymer-Supported Catalysts: Synergy between Catalytic Reaction Mechanism and Polymer Design. Nandita Madhavan, Christopher W. Jones, and Marcus Weck, *Acc. Chem. Res.*, **2008**, 41 (9), 1153-1165.

### 7.3. Direcciones web de interés

### 7.4. Otros recursos

## 8. Metodología didáctica

Aprendizaje presencial (30 horas):

Sesiones teóricas: 18 horas presenciales donde se explicarán los aspectos más generales de la asignatura a través de clases expositivas promoviendo la participación del estudiante (se incluirán debates y puestas en común), que formarán parte de la evaluación

Sesiones de prácticas (problemas): 2 horas presenciales donde se harán y evaluarán ejercicios prácticos sobre la forma de llevar a cabo un determinado proceso. Hojas a disposición del alumno en el aula virtual

Tutorías grupales: 7 horas presenciales que se reforzarán con el uso del aula virtual y sistemas de comunicación electrónica. La asistencia y participación formarán parte de la evaluación

Evaluación: 3 hora presencial de pruebas escritas

Aprendizaje no presencial (45h):

- Búsqueda bibliográfica: 10h relacionadas con la materia impartida que ayudarán al estudiante a conseguir una mejor comprensión de la asignatura

- Lecturas de material: 10h el estudiante trabajará la bibliografía aconsejada por el profesor sobre las publicaciones más recientes relacionadas con la asignatura

- Elaboración de un trabajo: 15h Este trabajo formará parte de la evaluación. La elaboración del mismo seguirá las pautas indicadas por el profesor de la asignatura

- Estudio individual: 10h Entender el material proporcionado en clase y poder preparar las distintas pruebas que forman parte de la evaluación

## 9. Planificación de actividades

Actividades	Horas presenciales	Horas no presenciales
Enseñanzas teóricas	18	0
Enseñanzas prácticas (problemas)	2	0
Tutorías	7	0
Evaluación	3	0
Trabajo personal	0	25
Trabajo de preparación de los exámenes	0	20
	<b>30</b>	<b>45</b>
<b>Horas totales (núm. créditos * 25)</b>	<b>75</b>	

## 10. Sistema de evaluación

### 10.1. Tipo de prueba

Tipo de prueba	Ponderación
Participación en clase	10
Pruebas escritas	40
Trabajos	50
	100

### 10.2. Criterios de superación de la asignatura

A) Se deberá obtener una nota mínima de 5 sobre 10 en cada una de las pruebas para superarlas. Si no se supera alguna de las pruebas en la segunda convocatoria se examinará solo de la prueba no superada.

B) Presentarse a todas las pruebas (presentar los trabajos y realizar las pruebas escritas)

## 11. Otra información

Asignatura impartida por

Santiago V Luis (UJI)

Belen Altava (UJI)

## 12. Software específico



## 13. Privacidad y tratamiento de datos personales

Las actividades académicas que comporten un tratamiento de datos de personas identificadas o identificables están sometidas a lo previsto en el Reglamento General de Protección de Datos UE 2016/679, de 27 de abril (RGPD) y en la Ley Orgánica 3/2018, de 5 de diciembre, de Protección de Datos Personales y garantía de los derechos digitales (LOPDGDD) además de la legislación vigente específica.

En los espacios docentes físicos y virtuales de la universidad, con carácter general, en ningún caso se podrán realizar actividades que traten datos personales, incluyendo grabaciones, sin el consentimiento expreso previo y libre de las personas afectadas.

No se podrán realizar actividades que conlleven acceso a recursos externos a los medios de la UJI, en Internet u online, que obliguen a los estudiantes a dar sus datos personales o el consentimiento expreso. Se utilizarán exclusivamente datos anónimos.

Este anonimato debe garantizarse en todas las fases del tratamiento. Sólo en el caso de que la información se haya sometido a un procedimiento de disociación, de modo que la información que se obtenga no pueda asociarse a persona identificada o identificable, se estará cumpliendo con la normativa vigente.

Si, excepcionalmente y de manera justificada, a criterio del responsable de la actividad se tratan datos de personas identificadas o identificables, el responsable de la actividad deberá inscribirla en el registro oficial de actividades de tratamiento de la UJI (RAT) y obtener la autorización de la Secretaría General; así mismo elaborará la información que hay que ofrecer a los usuarios, aplicará las medidas de seguridad necesarias y proporcionará la información requerida durante los procesos de auditoría, tomando, en su caso, las medidas correctoras que estas auditorías aconsejen.

*Vicerrectorado de Estudios y Docencia*