



GUÍA DOCENTE

SJH006 - Catálisis Homogénea

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: María Isabel Burguete Azcárate

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 se considera fundamental dentro del programa del master de química sostenible, ya que la Catálisis es uno de los principios fundamentales de la Química Verde. Constituye una parte fundamental del bloque de catalisis. Dicho bloque esta formado por Catálisis Homogénea, Catálisis Heterogénea, Biocatálisis. En esta asignatura se explican los principios básicos de la catálisis.

3. Conocimientos previos recomendables

Los indicados para ser admitido en el Master de Química Sostenible: Equivalente a estudios de grado en Química, Ingeniería Química u otras titulaciones afines.

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

- CH_01_Adquirir conocimientos de los conceptos generales y principios básicos de la Catálisis.
- CH_02_Obtener un conocimiento general de la situación actual de la Catálisis Homogénea y cuales son los principales retos para tratar de mejorar la sostenibilidad de un proceso catalítico.
- CH_03_Conocer los principales procesos y tipos de reacciones catalíticas.
- CH_04_Conocer el papel que la luz juega en la formación de enlaces carbono-carbono en procesos catalíticos.
- CH_05_Conocer las aplicaciones y tendencias actuales para cumplir con los postulados de la Química Sostenible en Catálisis Homogénea.
- CH_06_Analizar el tipo de fotocatalizadores y el mecanismo de su acción
- CH_07_Saber buscar, seleccionar y valorar la información
- CH_08_Definir las herramientas de la Química Sostenible en el area de la Catálisis Homogénea
- CH_09_Saber comunicarse de forma oral y escrita correctamente
- CH_10_Saber conducir y planificar su propio aprendizaje

5. Contenidos

- Conceptos Básicos de Catálisis
- Catálisis Homogénea: Organocatálisis
- Catálisis Asimétrica
- Catálisis Ácido-Base
- Cicloadiciones catalizadas por Acidos de Lewis Quirales
- Hidrogenación; Hidroformilación.
- Epoxidación; Ciclopropanación; Aziridinación.
- Reacciones con Pd
- Transformaciones Secuenciales
- Transformación de la Luz en Energía Química: Procesos Catalíticos.
- Fotocatálisis Positiva

6. Temario

TEMA 1. Conceptos básicos de catálisis. definición de catálisis y de catalizador, actuación de un catalizador, eficacia de un catalizador: TOF y TON. Selectividad: Químico, Regio y Enantioselectividad. Tipos de catálisis: Homogénea, Heterogénea, Enzimática. Tipos de catalizadores. Química verde: conceptos; alternativas para una química sostenible.

TEMA 2. Catálisis homogénea. Organocatálisis. Mecanismo. Tipos de organocatalizadores (prolina y derivados). Reacciones

TEMA 3. Catálisis con metales. Estrategias para la recuperación de catalizadores homogéneos, Catálisis de coordinación. Catálisis organometálica.

TEMA 4. CATÁLISIS ÁCIDO-BASE.- Reacciones catalizadas por ácidos y bases minerales: aplicaciones a nivel industrial; Reacciones con balance negativo reactivos/productos/residuos; Nuevos ácidos de Lewis activos en medio acuoso. Aplicaciones; Catalizadores ácido-base en líquidos iónicos; en medios bifásicos fluorados y en medio supercrítico; Reacciones estereoselectivas.

TEMA 5-6 HIDROGENACIÓN-HIDROGENACIÓN DE TRANSFERENCIA. Hidrogenación: antecedentes históricos; características estructurales de los ligandos; Hidrogenación asimétrica: control de la inducción; modelo del cuadrupolo; mecanismo; aplicaciones; Hidrogenación asimétrica de transferencia. Aplicaciones; Hidrogenación en medio supercrítico; Hidrogenación en medio bifásico fluorado; Hidrogenación en medio acuoso; HIDROGENACIÓN DE TRANSFERENCIA- Moléculas dadoras de hidrógeno; Sistemas reductores; aplicaciones

TEMA 7-8. CARBONILACIÓN. Reacción de hidroformilación; mecanismo, aplicaciones; Reacción de hidrocarboxilación

TEMAS 9-11. EPOXIDACIÓN; CICLOPROPANACIÓN; AZIRIDINIZACIÓN

Epoxidación: antecedentes históricos, aplicaciones industriales; Epoxidación asimétrica: Reacción de Sharpless: mecanismo, aplicaciones; Sistema Jacobsen-Katsuki: mecanismo, aplicaciones; Ciclopropanación: ligandos box y metales en ciclopropanación asimétrica; mecanismo; aplicaciones; Aziridinización asimétrica: metales y ligandos; mecanismo, aplicaciones.

TEMA 12. PALADIO, ORO, Reacciones de formación C-C: Reacción de Heck; Reacción de Suzuki; Reacción de Sonogashira, etc...Mecanismos, aplicaciones

Tema 13. Química Verde: Transformación de la luz en energía química- Fundamentos de Fotoquímica

Leyes de la Fotoquímica. Diagrama de Energía: diagrama de Jablonski. Propiedades estáticas de los estados excitados. Reacciones Térmicas vs Fotoquímicas. Aspectos experimentales: espectro de absorción, medidas en estado estacionario, lámparas, reactores fotoquímicos. Reacciones Fotoquímicas en Síntesis

TEMA 14. Transformación de la luz en energía química - procesos catalíticos (I)

Procesos catalíticos activados por la luz. Luz-Energía Química: Aprendiendo de las plantas. Fotosensibilización: estados excitados e intermedios reactivos. Fotocatalizadores-moléculas orgánicas. Fotocatalizadores-semiconductores

TEMA 15. Transformación de la luz en energía química - procesos catalíticos (II)

Modos más Frecuentes de Actuación delFotocatalizador. Clases deFotocatalizadores. Transferencia electrónica: Intermedios . Abstracción de hidrógeno. Conclusiones: Química Verde y Fotocatálisis

7. Bibliografía

7.1. Bibliografía básica

- 1) N. Jain et al., *Tetrahedron*, 61(2005), 1015-1060.
- 2) W. Miao et al., *Acc. Chem. Res.*, (2006), 39, 897-908.
- 3) W. Leiter et al., *Acc. Chem. Res.*, (2002), 35, 746-756.>
- 4) C. A. Eckert et al., *J. Phys. Chem. B*, (2006), 11, 627-640.
- 5) R.D. Rogers et al., *Green Chem.*, (2005), 7, 64-82.
- 6) S. Kobayashi et al. , *Acc. Chem. Res.*, (2002), 35, 209-217.
- 7) S. Kobayashi et al. , *Pure Appl. Chem.*, (2000), 72(7), 1331-1333.
- 8) B-X. Luang et al., *J. Catal.*, (2004)226, 301-307.
- 9) J. Xiang et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, (2001), 40(19), 3670-3672.
- 10) P. E. Savage et. al, *Chem. Rev.* (1999), 603-621.
- 11) R. Noyori, *Chem. Commun.*, (2005), 1807-1811.
- 12) A. P. Abbot, *Green Chem.*, (2005), 7, 721-725.
- 13) F. Joo, *Acc. Chem. Res.*, (2002), 35, 738-745.
- 14) M. L. Clarke et al., *Chem Eur. J.*, (2006), 12, 7978.
- 15) P. Wasserscheid et al., *Green Chem.*, (2002), 4, 400-404.
- 16) I. W. C. E. Arends et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, (2006), 45, 6250.
- 17) N. Mizuno et al., *Adv. Synth. Catal.*, (2003), 3454, 1193.
- 18) G. Streckel et al, *J. Am. Chem. Soc.*, (2006), 128, 14006-14007.
- 19) M. Merino, et al., *Chem. Eur. J.*, (2004), 10, 758-765.
- 20) H. Werner et al., *Adv. Synth. Catal.*, (2006), 348, 125-132.

- 21) P. G. Jessop et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, (1999), 38(8), 1143.
- 22) A. M. Treziack et al, *Coord. Chem. Rev.*, (2005), 249, 2308-2322.
- 23) A. B. Holmes et al., *Chem. Commun.*, (1998), 1395.
- 24) *Current Organic Chemistry*, (2005), 9(7), 595.
- 25) L. Lou et al, *Topics in Catalysis*, (2005), 35(1-2).
- 26) J. J. Müller et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, (2004), 43, 5997.
- 27) L. F. Tietze et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, (1993), 32, 131.
- 28) S. P. H. Mee et al., *Angew. Chem.*, (2004), 196, 1152.
- 29) C. W. Huang, *Tetrahedron*, (2003), 59, 3635.
- 30) P. I. Dalko, L. Moisan, *Ang. Chem.* (2001), 40, 3726-48
- 31) M. Fagnoni, D. Dondi, D. Ravelli, A. Albini, *Chem Rev.* (2007), 107, 2725-2756

7.2. Bibliografía complementaria

- 1) J. Tsuji. "Palladium Reagents and Catalysts". Wiley
- 2) A. W. Parkins, R.C. Poller. "An Introduction to Organometallic Chemistry". Ed Macmillan
- 3) Timothy J. Danohae, "Oxidation and Reduction in Org. Synt". Oxford Science Publications
- 4) Robert Whitman "Applied Organometallic Chemistry and Catalysis" . Oxford Science Publications
- 5) E. N. Jacobsen, A. Pfaltz, H. Yamamoto (Eds.). "Comprehensive Asymmetric Catalysis". Springer-Verlag: Berlin, 1999. Vols. 1-3.
- 6) I. Ojima (Ed.) "Catalytic Asymmetric Synthesis, 2nd Edition". Wiley-VCH: New York, 2000.
- 7) M. Kaneko, I. Okura (Eds). "Photocatalysis-Science and technology". Springer, Berlin, 2002.
- 8) A. Gilbert, J. Baggott (Eds). "Essentials of Molecular Photochemistry". Blackwell Science, Oxford, 1991.
- 9) J. Mattay, A. Griesbeck, (Eds.), "Photochemical Key Steps in Organic Synthesis. An Experimental Course Book", VCH, Weinheim, 1994.

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 (45 horas):

- Búsqueda bibliográfica: 10 horas no presenciales relacionadas con la materia impartida que ayudarán al estudiante a conseguir una mejor comprensión de la asignatura
- Lecturas de material: 10 horas no presenciales con las que el estudiante trabajará la bibliografía aconsejada por el profesor sobre las publicaciones más recientes relacionadas con la asignatura
- Elaboración de un trabajo: 15 horas no presenciales . Este trabajo formará parte de la evaluación. La elaboración del mismo seguirá las pautas indicadas por el profesor de la asignatura
- Estudio individual: 10 horas no presenciales para 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
	30	45
Horas totales (núm. créditos * 25)	75	

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

Profesorado que la imparte:

M^a. José Sabater (UPV)

Julia Pérez (UVEG)

Isabel Burguete (coordinadora) (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