

| DATOS DE LA ASIGNATURA | | | | | |
|------------------------|--|---------------------|--------------------------------|----------------------|----|
| Asignatura: | Introducción a la Catálisis Homogénea | | | Código: | |
| Módulo: | | | | Materia: | |
| Carácter: | Optativa | Curso: 4º | | Cuatrimestre: | 1º |
| Créditos ECTS | 2.5 | Teóricos: | 2.5 | Prácticos: | |
| Departamento/s: | Química y Ciencia de los Materiales "Prof. J. Carlos Vílchez Martín" | | Área/s de Conocimiento: | Química Inorgánica | |

| PROFESOR/A | | E-mail | Ubicación | Teléfono |
|-----------------------------|----------------|---|------------|-----------|
| Prof 1: Ana Caballero Bevia | | ana.caballero@dqcm.uhu.es | EXP4-N5-01 | 959219952 |
| Prof 2: | | | | |
| Horario Tutorías | Prof. 1 | Lunes, miércoles y viernes de 17h a 19h | | |
| | Prof. 2 | | | |
| | Prof. 3 | | | |
| Campus Virtual | Moodle | | | |

| | |
|---|---|
| Contexto de la asignatura | <p><u>Enquadre en el Plan de Estudios</u> 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.</p> <p><u>Repercusión en el perfil profesional</u> 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.</p> |
| Objetivo General de la Asignatura: | 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. |

| | |
|--|---|
| <p>Competencias básicas o transversales</p> | <p>B1. Capacidad de análisis y síntesis B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa B2. Capacidad de organización y planificación B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información / conocimiento B6. Resolución de problemas B8. Trabajo en equipo B9. Razonamiento crítico B11. Sensibilidad hacia temas medioambientales 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. Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.</p> |
| <p>Competencias específicas</p> | <p>C1. Conocer los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades. C2. Conocer los tipos principales de reacción química y las principales características asociadas a cada una de ellas. C10. Conocer los aspectos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo estereoquímica.</p> |
| <p>Recomendaciones</p> | <p>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.</p> |
| <p>BLOQUES TEMÁTICOS</p> | <p>1. Introducción a la catálisis (temas 1 y 2) 2. Reacciones catalíticas (temas 3 a 5)</p> |

| | |
|--|--|
| <p>Temario Teórico y Planificación Temporal:</p> | <p>Tema 1. Conceptos básicos y definiciones.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Desarrollo sostenible. Química verde • Catalizador • Aspectos energéticos de una reacción • Ciclos catalíticos • Propiedades de los catalizadores • Selectividad de una reacción <ul style="list-style-type: none"> – Quimioselectividad, regioselectividad y enantioselectividad • Clasificación de los catalizadores • Catálisis homogénea y catálisis heterogénea • La catálisis y la industria química <ul style="list-style-type: none"> – Economía atómica, factor E y selectividad atómica <p>Tema 2. Compuestos organometálicos.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Definiciones • Metales de transición <ul style="list-style-type: none"> – Formación de complejos – Tipos de ligandos • Regla del número atómico efectivo • Estado de oxidación • Reacciones fundamentales de los compuestos organometálicos <p>Tema 3. Hidrogenación homogénea.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Activación de hidrógeno molecular • Catalizadores de hidrogenación • Productos homoquirales • Catálisis asimétrica • Ligandos quirales • Hidrogenación asimétrica de olefinas • Mecanismos de la hidrogenación asimétrica <p>Tema 4. Activación de enlaces C-H de hidrocarburos.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Importancia de la activación de hidrocarburos. • Antecedentes y problemas de la activación clásica de hidrocarburos. • Alternativa a la activación clásica: Reacciones de inserción de grupos carbeno en enlaces C-H • Funcionalización de alcanos ligeros. Mejora de la actividad catalítica. • El gran reto: activación de metano. Antecedentes. • Funcionalización de metano por inserción de carbenos bajo condiciones supercríticas. • Funcionalización de otros alcanos ligeros por inserción de carbenos bajo condiciones supercríticas. <p>Tema 5. Metátesis de olefinas.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Metátesis de olefinas: generalidades. • Complejos carbeno metálicos. • Mecanismo de la reacción de metátesis de olefinas. • Tipos de metátesis de olefinas. Ejemplos. • Aplicaciones de la metátesis de olefinas. • Metátesis de eninos. Aplicaciones. • Metátesis de alquinos. |
| <p>Temario Práctico y Planificación Temporal:</p> | |

| | | | | | |
|--|--|-----------------------------|---------------------------|--------------------------------|---------------------|
| <p>Actividades Dirigidas y Planificación Temporal</p> | <p>Las AAD se enfocan sobre los distintos bloques temáticos de la asignatura contribuyendo de manera significativa a alcanzar las competencias indicadas en los bloques temáticos. Habrá al menos dos actividades dirigidas por cada bloque temático.</p> <ol style="list-style-type: none"> Resolución de problemas por grupos. Se proponen colecciones de problemas a grupos reducidos de alumnos para su resolución. En clase se discuten y resuelven las dudas planteadas con su resolución. Resolución de cuestiones teóricas, tipo examen, por grupos. Aclaración de los conceptos de mayor dificultad de comprensión. Los alumnos también generan y resuelven cuestiones teóricas cortas, fomentando la autoevaluación de conocimientos y del grado de asimilación de los conceptos fundamentales de la materia. | | | | |
| <p>Metodología Docente Empleada:</p> | <ol style="list-style-type: none"> Proyector de transparencias, proyecciones con ordenador y fotocopias de apoyo con figuras, esquemas y tablas. Las clases se desarrollan de manera interactiva con los alumnos, discutiendo con ellos los aspectos que resultan más dificultosos o especialmente interesantes de cada tema. El material podrá obtenerse directamente desde la página web de la tutoría virtual Impartición de clases de problemas. Se resuelven problemas tipo, haciendo hincapié en la comprensión del mecanismo de resolución y resaltando la relación de los problemas con aplicaciones prácticas. Realización de actividades académicas dirigidas. Trabajo tutorizado con grupos reducidos donde el profesor/a orienta a los estudiantes para la realización de actividades que les ayuden a reforzar y asimilar los contenidos de la asignatura. | | | | |
| <p>Criterios de Evaluación:</p> | <p>La calificación final de la asignatura se obtendrá con los siguientes sumandos:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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. Calificación obtenida por la realización y/o exposición de trabajos realizados (bibliográficos, problemas, cuestiones), individualmente o en equipo y otras actividades académicas dirigidas. En la calificación final de la asignatura se tendrá en cuenta el incumplimiento por parte del alumno de las normas básicas de comportamiento y funcionamiento que debe respetar la comunidad universitaria de la Facultad de Ciencias Experimentales y que ha sido aprobada en Junta de Centro. | | | | |
| <p>Distribución Horas Presenciales</p> | <p>Grupo Grande</p> | <p>Grupo Pequeño</p> | <p>Laboratorio</p> | <p>Lab. Informática</p> | <p>Campo</p> |
| | <p>16</p> | <p>9</p> | <p>--</p> | <p>--</p> | <p>--</p> |
| <p>Bibliografía:</p> | <p>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.</p> | | | | |