

### GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA

DATOS DE LA ASIGNATURA			
<b>Asignatura:</b>	Introducción a la Catálisis Homogénea		<b>Código:</b> 757509308
<b>Módulo:</b>	Optativo		<b>Materia:</b> Química Inorgánica
<b>Curso:</b>	4º		<b>Cuatrimestre:</b> Primero
<b>Créditos ECTS</b>	3	<b>Teóricos:</b> 2	<b>Prácticos:</b> 1
<b>Docencia en inglés:</b>			
<b>Departamento/s:</b>	Química y Ciencia de los Materiales "Prof. J. Carlos Vílchez Martín"	<b>Área/s de Conocimiento:</b>	Química Inorgánica

DATOS DEL PROFESORADO	
<b>Coordinador:</b>	
<b>Campus Virtual</b>	<input checked="" type="checkbox"/> Moodle <input type="checkbox"/> Página web:

PROFESOR/A	e-mail	Ubicación	Teléfono
Ana Caballero Bevia	ana.caballero@dqcm.uhu.es	CIQSO 2.08	959219952
<b>Departamento:</b>			
<b>Horario</b>	<b>Lunes</b>	<b>Martes</b>	<b>Miércoles</b>
<b>Tutorías</b>	17-19	17-19	17-19
			<b>Jueves</b>
			<b>Viernes</b>

CONTEXTO, OBJETIVOS, COMPETENCIAS, PROGRAMA, EVALUACIÓN Y TEMPORALIZACIÓN	
<b>Contexto de la asignatura</b>	<p><u>Encuadre 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>
<b>Objetivo General de la Asignatura:</b>	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.

### Descripción de competencias

#### Competencias básicas o transversales

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.

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.

<p><b>Competencias específicas</b></p>	<p>C14 - Conocer la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.</p> <p>C15 - Conocer la estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos.</p> <p>C16 - Conocer las técnicas instrumentales y sus aplicaciones.</p> <p>C17 - Conocer las operaciones unitarias de Ingeniería Química.</p> <p>C18 - Conocer la metrología de los procesos químicos incluyendo la gestión de calidad.</p> <p>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.</p> <p>C6 - Conocer los principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.</p> <p>Q1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la química.</p> <p>Q2. Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.</p> <p>Q3. Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.</p> <p>Q4. Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico y profesional.</p> <p>Q5 - Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.</p> <p>Q6. Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.</p> <p>Q7 - Ser capaz de elaborar y gestionar proyectos.</p> <p>P1 - Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.</p> <p>P2 - Habilidad para llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.</p> <p>P3 - Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.</p> <p>P4 - Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para estudios estructurales y separaciones.</p> <p>P5 - . Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.</p> <p>P6 - Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.</p>
<p><b>Recomendaciones</b></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><b>UNIDADES TEMÁTICAS</b></p>	<p><b>1. Introducción a la catálisis (temas 1)</b> <b>2. Reacciones catalíticas (temas 2 a 6)</b></p>

**Temario Teórico y  
Planificación  
Temporal:**

**Tema 1. Conceptos básicos y definiciones. (S7)**

- 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. (S8,S9)**

- 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. (S10,S11)**

- 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. (S12,13)**

- 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. (S13,S14)**

- 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. (S15)**

- 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

<b>Temario Práctico y Planificación Temporal:</b>	<b>1.- Reacción de Hidrogenación.(Día 1)</b> <b>2.- Reacción de metátesis de olefinas. (Día 2)</b>				
<b>Actividades a realizar en las horas de Grupo Reducido</b>					
<b>Otras actividades</b>					
<b>Metodología Docente Empleada:</b>	<p>1. 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</p> <p>2. 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.</p> <p>3. 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>				
<b>Criterios de Evaluación:</b>	<p>La calificación final de la asignatura se obtendrá con los siguientes sumandos:</p> <p>1. 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 80 % de la calificación total de la asignatura.</p> <p>2. 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 20% de la calificación total de la asignatura.</p>				
<b>Distribución Horas Presenciales</b>	<b>Grupo Grande</b>	<b>Grupo Pequeño</b>	<b>Laboratorio</b>	<b>Lab. Informática</b>	<b>Campo</b>
	15		10		
<b>Bibliografía:</b>	<p>Básica:</p> <p>G. W. Parshall, S. D. Ittel, "Homogeneous Catalysis", Second Edition, Willey &amp; Sons, 1992.</p> <p>-B. G. Gates, "Catalytic Chemistry" Willey &amp; Sons.</p> <p>-P. Powell, "Principles of Organometallic Chemistry", Second Edition, Chapman &amp; Hall, 1988.</p> <p>-R. H. Crabtree "The Organometallic Chemistry of the Transition Metals", Willey &amp; Sons.</p>				
	Específica:				
	Otros recursos:				

### ANEXO 1

HORAS DE TRABAJO DEL ALUMNO								
Presencial			Estudio			Otros Trabajos	Examen incluyendo preparación	TOTAL
Teoría	Problemas	Prácticas	Teoría	Problemas	Prácticas			
15		10	16		13	5 AAD	16	75

(AAD = Actividades Académicas Dirigidas)

**Cronograma orientativo (se indica la temporalización de la asignatura por semanas)**

**Unidades temáticas:**

**Dedicación presencial (incluye actividades dirigidas)**

Cuatrimestre

Actividad	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
<b>Teoría</b>							X	X	X	X	X	X	X	X	X
<b>Prácticas</b>					X	X									
<b>Actividades dirigidas</b>										X	X	X	X	X	