



GUÍA DOCENTE

SJH006 - Catálisis Homogénea

Curso académico 2024/2025

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 Inorgánica

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](#)

Profesorado responsable: José Antonio Mata Martínez

Para consultar el listado de profesorado 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 máster en Química Sostenible, ya que la catálisis es uno de los principios esenciales de la química verde. Constituye una parte fundamental del bloque de catálisis. Dicho bloque está formado por catálisis homogénea, catálisis heterogénea y biocatálisis. En esta asignatura se explican los principios básicos de la catálisis.

3. Conocimientos previos recomendables

Los indicados para ser admitido en el máster en 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 ácidos quirales de Lewis
- 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: quimio, 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. Mecanismos. Tipos de organocatalizadores. Reacciones.

TEMA 3. Estrategias para la recuperación de catalizadores homogéneos

Catálisis en medios bifásicos. Tipos de sistemas bifásicos. Catálisis macromolecular. Catálisis de coordinación. Catálisis organometálica.

TEMA 4. Catálisis ácido-base

Reacciones catalizadas por ácidos y bases: aplicaciones a nivel industrial. Problemática de reacciones industriales con balance negativo reactivos/productos/residuos. Reacciones catalizadas por ácidos: acilación Friedel-Crafts; reacción aldólica; alquilación de aromáticos; reacción de esterificación. Reacciones catalizadas por bases: adición de Michael; condensación de Knoevenagel.

TEMA 5. Hidrogenación

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. Autotransferencia de hidrógeno: aplicaciones.

TEMA 6. Carbonilación

Reacción de hidroformilación; mecanismo, aplicaciones. Reacción de hidrocarboxilación.

TEMAS 7-9. 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 10. Reacciones de acoplamiento C-C

Reacciones de formación C-C: reacción de heck; reacción de suzuki; reacción de sonogashira, etc. Mecanismos, aplicaciones.

TEMA 11. 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, luces, reactores fotoquímicos. Reacciones fotoquímicas en síntesis.

TEMA 12. 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 13. Transformación de la luz en energía química - procesos catalíticos (II)

Tipos más frecuentes de actuación del fotocatalizador. Clases de fotocatalizadores. Transferencia electrónica: intermedios. Abstracción de hidrógeno. Conclusiones: química verde y fotocatalisis.

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

Ver el aula virtual de la asignatura

7.4. Otros recursos

8. Metodología didáctica

Aprendizaje presencial (30 horas):

- Sesiones teóricas: 18 horas presenciales durante las que se explicarán los aspectos más generales de la asignatura a través de clases expositivas que promoverán la participación del estudiantado. Se incluirán debates y puestas en común que formarán parte de la evaluación.
- Sesiones de prácticas (problemas): 2 horas presenciales durante las cuales se harán y evaluarán ejercicios prácticos sobre la forma de llevar a cabo un determinado proceso. Habrá hojas a disposición del alumnado en el aula virtual.
- Tutorías grupales: 7 horas presenciales que se reforzarán con el uso del aula virtual y de los sistemas de comunicación electrónica. La asistencia y participación formarán parte de la evaluación.
- Evaluación: 3 horas presenciales de pruebas escritas.

Aprendizaje no presencial (45 horas):

- Búsqueda bibliográfica: 10 horas no presenciales relacionadas con la materia impartida que ayudarán al estudiantado a conseguir una mejor comprensión de la asignatura.
- Lecturas de material: 10 horas no presenciales en 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 profesorado 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	18:00	0:00
Enseñanzas prácticas (problemas)	2:00	0:00
Tutorías	7:00	0:00
Evaluación	3:00	0:00
Trabajo personal	0:00	25:00
Trabajo de preparación de los exámenes	0:00	20:00
	30:00	45:00
Horas totales (núm. créditos * 25)	75:00	

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) El alumnado debe 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 aquello previsto en el Reglamento General de Protección de Datos UE 2016/679, de 27 de abril, (RGPD) y a la Ley Orgánica 3/2018, de 5 de diciembre, de Protección de Datos Personales y Garantía de los Derechos Digitales (LOPDGDD) además de aquella legislación vigente específica.

En los espacios docentes físicos y virtuales de la Universidad, con carácter general, solo se podrán realizar aquellas actividades de tratamiento de datos personales que estén amparadas por la normativa vigente, incluyendo la grabación o difusión en línea (streaming), o resoluciones e instrucciones derivadas de situaciones de carácter excepcional, además de estar inscritas en el Registro de Actividades de Tratamiento (RAT) institucional de la UJI.

No se podrán realizar actividades que comporten acceso a recursos externos a los medios de la UJI, en Internet o en línea, que obliguen al estudiantado a dar sus datos personales o al consentimiento expreso. Se

utilizarán exclusivamente datos anónimos.

Este anonimato se tiene que garantizar en todas las fases del tratamiento. Solamente en el supuesto de que la información se haya sometido a un procedimiento de disociación, de forma que la información que se obtenga no pueda asociarse a una persona identificada o identificable, se estará cumpliendo con la normativa vigente.

Si, excepcionalmente y de manera justificada, a criterio de la persona responsable de la actividad se tratan datos de personas identificadas o identificables, la persona responsable de la actividad los tendrá que inscribir en el Registro de actividades de tratamiento de la UJI (RAT) y obtener la autorización de la Secretaría General; así mismo, tendrá que elaborar la información que hay que ofrecer a los usuarios y usuarias, aplicar las medidas de seguridad necesarias y proporcionar la información requerida durante los procesos de auditoría, y tomar, si procede, las medidas correctoras que estas auditorías aconsejen.

Vicerrectorado de Estudios y Formación Permanente