



GUÍA DOCENTE 2012-2013

Activación de Enlaces por Complejos de Metales de Transición

1. Denominación de la asignatura:

Activación de Enlaces por Complejos de Metales de Transición

Titulación

Máster en Química Avanzada

Código

5255

2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:

Formación General

3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Departamento de Química

4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :

Gabriel García Herbosa, José Vicente Cuevas Vicario



4.b Coordinador de la asignatura

José Vicente Cuevas Vicario

5. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

1º semestre master

6. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Optativa

7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

Se requiere un conocimiento avanzado en Química Inorgánica y Orgánica.

8. Número de créditos ECTS de la asignatura:

5

9. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS:

- E1. Mecanismos de activación de enlaces sencillos H-H, dobles OO y triples NN.
- E2. Los principales mecanismos que conducen a la activación de enlaces O-H.
- E3. Los principales mecanismos que conducen a la activación de enlaces N-H.
- E4. Mecanismos para la formación de enlaces C-N activados por complejos de metales de transición.
- E5. Mecanismos para la activación de las moléculas de agua y de CO₂ mediante complejos de metales de transición.

COMPETENCIAS GENERALES:

- G1. Habilidades de comunicación oral y escrita en la lengua nativa
- G2. Habilidades de comunicación oral y escrita en una segunda lengua
- G3. Habilidades para la búsqueda y obtención de información, ya sea en fuentes primarios como en las secundarias, incluyendo la que se consigue a través de comunicación on-line y mediante acceso a bancos de datos.
- G4. Habilidades para la síntesis, para elaborar informes y para presentarlos
- G5. Habilidades y destrezas en los aspectos prácticos, en la habilidad manual para realizar tareas.



- G6. Habilidades para el estudio y el aprendizaje de forma autónoma, necesarios para la formación continua y el desarrollo profesional
- G7. Habilidades relacionadas con las herramientas informáticas y con las tecnologías de la información (tales como, manejo de procesadores de texto, hojas de cálculo, bases de datos, comunicación en internet, etc.)
- G8. Capacidad para el trabajo en grupo
- G9. Habilidades en la aplicación del razonamiento deductivo y en el aprovechamiento de la capacidad creativa, mediante la introducción en la investigación.

10. Programa de la asignatura

10.1- Objetivos docentes
Generales: Transmitir la importancia de los metales de transición y sus compuestos en catálisis molecular. Transmitir conocimiento actualizado sobre la activación de enlaces sencillos H-H(activación de hidrógeno), dobles O=O (activación de oxígeno), y triples NN (activación de nitrógeno). Activación de enlaces C-H, O-H y N-H por complejos de metales de transición. Estudio de esta activación en importantes reacciones catalizadas como la reacción “water gas shift”, el proceso Wacker, “hidration” de olefinas y nitrilos, la transferencia de hidrógeno a alquinos o la hidroaminación de olefinas. Abordar el asunto de la fotosíntesis artificial (reducción catalizada de CO₂ con agua). Específicos: Conocer la enorme importancia de la necesidad de activar el agua en los esquemas de conversión y almacenamiento de energía solar a combustibles solares. Describir y estudiar con detalle la adición oxidante de aminas sobre metales como un paso importante en procesos de aminación. Discernir entre los posibles mecanismos del proceso de hidroaminación.
10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Activación de enlaces sencillos H-H, dobles O=O y triples NN Activación de hidrógeno, activación de oxígeno y activación de nitrógeno Activación de enlaces sencillos H-H(activación de hidrógeno), dobles O=O (activación de oxígeno), y triples NN (activación de nitrógeno)



Activación de enlaces C-H

Activación de enlaces C-H

Lectura comprensiva de artículos recientes sobre la activación de enlaces C-H promovida por complejos de metales de transición considerando detenidamente los aspectos más novedosos y menos conocidos por los estudiantes.

Activación de enlaces N-H.

Procesos de hidroaminación. Aspectos generales

Procesos de hidroaminación catalizada por complejos de metales del principio de las series de transición. Procesos de hidroaminación catalizada por complejos de metales del final de las series de transición. Regioquímica en los procesos de hidroaminación.

Activación de enlaces O-H. Activación de agua.

Aspectos generales de la activación de agua

Reacciones del agua con complejos de metales de transición en función de su posición en la tabla periódica. “Early-transition metals” y lantánidos: Hidrólisis y reducción a hidrógeno. “Late-transition metals”.

Catalizadores para la reacción de evolución de oxígeno (OER)

Uno de los aspectos más interesantes de la fotosíntesis artificial es la oxidación de agua hasta oxígeno promovida por catalizadores moleculares. Este es el lugar para considerar el estado actual a través de los artículos más recientes.

Hidruros

Formación de hidruros por reacción de complejos metálicos con agua. El sistema de Milstein (Science, 2009, vol 324, pg 74) para la descomposición de agua promovida por un catalizador de rutenio. Adición oxidante de agua y eliminación reductora de oxígeno.

Catalizadores para la reacción de evolución de hidrógeno (HER)

Lectura comprensiva de alguno de los artículos más recientes sobre catalizadores molecular para reducir agua a hidrógeno.



Activación de enlaces fotoinducida.

Ejemplos comentados

Estudio de ejemplos extraídos de la bibliografía sobre activación de enlaces fotoinducida.

Activación de pequeñas moléculas por metales de transición y sus compuestos

Activación de CO₂

Creación de enlaces C-H sobre la molécula de CO₂. Activación inducida por la luz. Fotosíntesis artificial. Combustibles solares.

10.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Antonio Togni, Hansjörg Grützmacher (Editors), (2001) Catalytic Heterofunctionalization, John Wiley and Sons, 3-527-30234-4,

Karen I. Goldberg and Alan Goldman, Activation and Functionalization of C-H Bonds , Oxford University Press,

Piet W. N. M. Van Leeuwen, (2004) Homogeneous catalysis - understanding the art, Kluwer Academic Publishers, 1-4020-1999-8,

William B. Tolman, (2006) Activation of small molecules : organometallic and bioinorganic perspectives , Weinheim (Germany) : Wiley-VCH,

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Blum, O.; Milstein, D., (2002) Oxidative Addition of Water and Aliphatic Alcohols by IrCl(trialkylphosphine)₃, Journal of the American Chemical Society;, (124,) 38,, 11456–11467

Claudia M. Fafard, Debashis Adhikari, Bruce M. Foxman, Daniel J. Mindiola, and Oleg V. Ozerov, (2007) Addition of Ammonia, Water, and Dihydrogen Across a Single Pd–Pd Bond, Journal of the American Chemical Society;, (129,) 34, , 10318–10319

David Morales-Morales, Do W. Lee, Zhaohui Wang, and Craig M. Jensen, (2001) Oxidative Addition of Water by an Iridium PCP Pincer Complex: Catalytic Dehydrogenation of Alkanes by IrH(OH){C₆H₃-2,6-(CH₂P^tBut)₂}₂, Organometallics; , (20,) 6, , 1144-1147

Dorta, R.; Rozenberg, H.; Shimon, L. J. W.; Milstein D, (2002) Oxidative Addition of Water to Novel Ir(I) Complexes Stabilized by Dimethyl Sulfoxide Ligands, Journal of the American Chemical Society;, (124,) 33,, 188–189



Frauke Pohlki and Sven Doye, (2003) The catalytic hydroamination of alkynes, Chemical Society Reviews; , (32,) 2, , 104 - 114

John F. Hartwig, (2004) Development of catalysts for the hydroamination of olefins, Pure and Applied Chemistry; , (76,) 3, , 507-516

Markus Nobis, Birgit Drießen-Hölscher, (2001) Recent Developments in Transition Metal Catalyzed Intermolecular Hydroamination Reactions - A Breakthrough?, Angewandte Chemie International Edition; , (40,) Issue 21, , 3983 - 3985

Peter W. Roesky, Thomas E. Müller, (2003) Enantioselective Catalytic Hydroamination of Alkenes, Angewandte Chemie International Edition; , (42,) 24, , 2708 - 2710

Ruslan Pryadun, Dinesh Sukumaran, Robert Bogadi, and Jim D. Atwood, (2004) Amine Attack on Coordinated Alkenes: An Interconversion from Anti-Markovnikoff to Markovnikoff Products, Journal of the American Chemical Society; , (126,) 3, , 12414-12420

Sukwon Hong and Tobin J. Marks, (2004) Organolanthanide-Catalyzed Hydroamination, Accounts of Chemical Research; , (37,) 9, , 673-686

Thomas E. Müller and Matthias Beller, (1998) Metal-Initiated Amination of Alkenes and Alkynes, Chemical Reviews; , (98,) 2, , 675-704

11. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Asistencia a clases magistrales	E1-E4	18	22	40
Asistencia a clases prácticas (en laboratorio o aula de informática)	E1-E4, G1, G5, G7, G8, G9	8	12	20
Asistencia a seminarios y actividades	E1-E4, G1, G2, G3	5	7	12
Asistencia a tutorías asistidas	E1-E4	5	5	10
Presentación de trabajos	E1-E4, G1, G2, G3, G4, G6, G7, G8, G9	5	25	30
Realización de	E1-E4, G1, G2	4	9	13



pruebas de evaluación			
Total	45	80	125

12. Sistemas de evaluación:

Exceptuando la participación activa, en segunda convocatoria serán recuperables cada una de las partes contempladas en el procedimiento de evaluación, según la ponderación especificada para cada una de ellas.

Procedimiento	Peso en la calificación final
participación activa	20 %
preguntas formuladas y repuestas emitidas	10 %
preparación de los temas y exposición de los mismos	40 %
prueba escrita sobre los contenidos abordados	30 %
Total	100 %

13. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

La docencia se desarrolla en el aula/sala/despacho con apoyo de pizarra, recursos de red (plataforma UBUVirtual y contenidos de internet) y medios de proyección audiovisual. El apoyo tutorial se lleva a cabo por los procedimientos establecidos en la UBU (<http://www.ubu.es/quimica>)

14. Calendarios y horarios:

Los establecidos por la Facultad y publicados en la página web del título (<http://www.ubu.es/quimica>)

15. Idioma en que se imparte:

Español (también documentos en inglés)