



GUÍA DOCENTE 2022-2023

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

7465

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 BÁSICAS Y GENERALES

BÁSICAS

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

CB10.- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

GENERALES

CG2.- Tener conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio incluyendo las habilidades básicas en Tecnologías de la Información y Comunicación

CG4.- Poseer la capacidad de comprender el inglés, siendo capaz de utilizarle para expresar conceptos relacionados con el ámbito de estudio

CG5.- Tener habilidades en las relaciones interpersonales, demostrando iniciativa,



liderazgo y motivación por la calidad, de modo que pueda desarrollar trabajos en equipo

CG6.- Poseer la capacidad de gestionar, evaluar, interpretar, sintetizar y transmitir adecuadamente la información relativa al ámbito de estudio

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE1- Haber adquirido conocimientos avanzados de Química demostrando, en un contexto altamente especializado, una comprensión detallada y fundamentada de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en Química.

CE4.- Ser capaces de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas en Química mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo.

CE5.- Tener la capacidad para proyectar y optimizar experimentos, disminuyendo costes y tiempo, manteniendo la calidad de la información, el respeto al medio ambiente y a las normativas de calidad y seguridad.

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)

Unidad 1. Primera parte. (José Vicente Cuevas Vicario)

Tema 1

Activación de enlaces B-H y B-B.

Procesos de hidroboración catalizados por metales de transición

Tema 2

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.

Tema 3

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.

Tema 4

Activación de enlaces O-H.

Activación competitiva C-H vs O-H.

Unidad 2. Segunda parte. (Gabriel García Herbosa)

Tema 1

Aspectos generales de la activación de agua. Hidrólisis, reducción, oxidación y adición.

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. Estado actual a través de los artículos más recientes.

Tema 2

Activación de enlaces mediante reacciones de transferencia electrónica. PCET- (Proton Coupled Electron Transfer) Transferencias acopladas de electrones y protones. La activación de H₂O y CO₂ en sistemas de almacenamiento de energía (fotosíntesis artificial) requiere reacciones de transferencia de electrones y protones acopladas.

Tema 3

Catalizadores para la reacción de evolución de hidrógeno (HER). Formación de hidruros por reacción de complejos metálicos con agua. El sistema de David 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. Lectura comprensiva de alguno de los artículos más recientes sobre catalizadores molecular para reducir agua a hidrógeno.



Tema 4

Activación de CO₂.

Creación de enlaces C-H sobre la molécula de CO₂.

Activación inducida por la luz.

Fotosíntesis artificial.

Combustibles solares.

Tema 5. Prácticas de Laboratorio.

Síntesis que implican activaciones de enlaces por complejos de metales de transición.

Asignación de catalizador.

Estequiometría de la reacción de síntesis (ajuste).

Sugerir un mecanismo.

Estructura.

Síntesis en el laboratorio. Sesión de TRES horas.

Presentación Power Point incluyendo:

Ajuste de la reacción de síntesis

Artículo actual usando el catalizador asignado

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 , Weimheim (Germany) : Wiley-VCH,

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Blum, O.; Milstein, D., (2002) Oxidative Addition of Water and Aliphatic Alcohols by IrCl(trialkylphosphine)₃, ACS, 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, ACS, 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-(CH₂PBut₂)₂}, American Chemical Society, 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, American Chemical Society, 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?, Wiley, Angewandte Chemie International Edition, (40) Issue 21, 3983 - 3985
Peter W. Roesky, Thomas E. Müller, (2003) Enantioselective Catalytic Hydroamination of Alkenes, Wiley, 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, ACS, Journal of the American Chemical Society, (126) 3, 12414–12420
Sukwon Hong and Tobin J. Marks, (2004) Organolanthanide-Catalyzed Hydroamination, ACS, Accounts of Chemical Research, (37) 9, 673–686
Thomas E. Müller and Matthias Beller, (1998) Metal-Initiated Amination of Alkenes and Alkynes, ACS, Chemical Reviews, (98) 2, 675–704

10.4- Acceso a la Bibliografía Recomendada desde Leganto

https://leganto.ubu.es/leganto/public/34BUC_UBU/lists?courseCode=7465&auth=SAML

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	CB6, CB7, CB8, CB10, CG4, CE1, CE4	18	22	40
Asistencia a clases prácticas (en laboratorio o aula de informática)	CB6, CB7, CB8, CB10, CG4, CE5	8	12	20
Asistencia a seminarios y actividades	CB6, CB7, CB8, CB10, CG4, CE1, CE4	5	7	12
Asistencia a tutorías asistidas	CB6, CB7, CB8, CB10, CG4, CE1,	5	5	10



	CE4, CE1, CE4			
Presentación de trabajos	CB9, CB10, CG2, CG5, CG6, CE1, CE4	5	25	30
Realización de pruebas de evaluación	CB6, CB7, CB8, CB9, CG6, CE1	4	9	13
Total		45	80	125

12. Sistemas de evaluación:

El sistema de evaluación para estudiantes de intercambio deberá ser modificado en el supuesto de que los calendarios académicos de las universidades de origen y de destino no sean coincidente.

El profesor podrá utilizar cualquier herramienta antiplagio que la Universidad ponga a su disposición para asegurar que no ha habido copia o plagio en ninguna de las pruebas de evaluación realizadas por los estudiantes. Si el estudiante no autorizara su uso no podrá ser evaluado de ese procedimiento y se le calificará con un cero.

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Participación activa (1ª Conv.)/Actividad sustitutoria (2ª Conv.)	30 %	20 %
Elaboración de trabajos individuales, preparación de temas y exposición	40 %	40 %
Prueba escrita sobre los contenidos abordados	30 %	40 %
Total	100 %	100 %

Evaluación excepcional:

Preguntas formuladas a través de la plataforma (20%), entregas de cada uno de los temas (40%), prueba escrita sobre los contenidos abordados (40%)

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 y que pueden consultarse en la página web del título.



14. Calendarios y horarios:

Los establecidos por la Facultad y publicados en la página web del título.

15. Idioma en que se imparte:

Español (también documentos en inglés)