



Asignatura: Procesos Catalíticos en Química Orgánica
 Código: 32539
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster universitario en Química Orgánica
 Nivel: 2
 Tipo: Optativa
 Nº de créditos: 3 ECTS

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Procesos Catalíticos en Química Orgánica / Catalytic Processes in Organic Chemistry

1.1. Código / Course number

32539

1.2. Materia / Content area

Química Orgánica / Organic Chemistry

1.3. Tipo / Course type

Máster / Master (second cycle)

1.4. Nivel / Course level

Grado / Bachelor (first cycle)

1.5. Curso / Year

Primero/First

1.6. Semestre / Semester

Primero/First

1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también el inglés en el material docente / In addition to Spanish, English is also extensively used in teaching material

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

El curso está dirigido a estudiantes con Licenciatura o Grado en Química, Ciencias Ambientales, Ingeniería Química, Bioquímica o Farmacia. Se requieren conocimientos básicos de: Métodos de Síntesis Orgánica, Estereoquímica y Análisis Estructural

This course is suited for Graduate in Chemistry, Environmental Sciences, Chemical Engineering, Biochemistry or Pharmacy. Orientation to Organic Chemistry with basic knowledge on stereochemistry and structural analysis is required.



Asignatura: Procesos Catalíticos en Química Orgánica
 Código: 32539
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster universitario en Química Orgánica
 Nivel: 2
 Tipo: Optativa
 Nº de créditos: 3 ECTS

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a todas las actividades es obligatoria / Attendance is mandatory

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente / **Lecturer**: Nuria Rodríguez Garrido

Departamento de/ **Department of** Química Orgánica / Organic Chemistry

Facultad de/ **Faculty of** Ciencias / Science

Despacho - Módulo / **Office - Module**: módulo 01 (408)

Teléfono / **Phone**: +34 91 497 2711

Correo electrónico/**Email**: n.rodriguez@uam.es

Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Previa petición de hora por correo electrónico / **Upon appointment request E-mail**

Docente / **Lecturer**: José Alemán Lara

Departamento de/ **Department of** Química Orgánica / Organic Chemistry

Facultad de/ **Faculty of** Ciencias / Science

Despacho - Módulo / **Office - Module**: 401 - módulo 01

Teléfono / **Phone**: +34 91 497 3875

Correo electrónico/**Email**: jose.aleman@uam.es

Página web/**Website**: www.uam.es/jose.aleman

Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Previa petición de hora por correo electrónico / **Upon appointment request E-mail**

Docente / **Lecturer**: Pablo Mauleón Pérez

Departamento de / **Department of**: Química Orgánica / Organic Chemistry

Facultad de/ **Faculty of**: Ciencias / Science

Despacho - Módulo / **Office - Module**: 409 - módulo 01

Teléfono / **Phone**: +34 91 497 2208

Correo electrónico/**Email**: pablo.mauleon@uam.es

Página web/**Website**: Moodle

Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Previa petición de hora por correo electrónico / **Upon appointment request E-mail**



1.11. Objetivos del curso / Course objectives

Este curso tiene como objetivo proporcionar al alumno una visión integral y multidisciplinar de los conceptos más importantes y actuales en catálisis aplicados a la síntesis orgánica. A lo largo del curso se hará un énfasis especial en aspectos mecanísticos, un aspecto clave en el diseño de nuevos catalizadores con mejores prestaciones, que permita mejorar la eficacia y ampliar el rango de aplicación de los procesos catalíticos. También se incidirá en los factores que rigen la implementación industrial de los procesos de catálisis, de acuerdo con las necesidades de la industria química moderna.

De esta manera, los principales resultados del aprendizaje de esta material incluirán:

- Conocer los métodos de síntesis orgánica más relevantes basados en procesos catalíticos.
- Conocer y comprender los mecanismos de reacción comúnmente aceptados en Química Orgánica y los métodos disponibles para su determinación.
- Conocer el impacto de la Química Orgánica en la industria, medio ambiente, farmacia, salud, agroalimentación y energías renovables.
- Acceder a la información necesaria (base de datos, artículos científicos, etc) y adquirir suficiente criterio para su interpretación y empleo.

Catalysis is a common denominator underpinning the modernization of our chemical industry. It ensures more efficient use of finite natural resources, it helps prevent waste and air pollution, and it makes our industry safer. Increasing demands on more efficient, cost-effective and environmentally benign industrial processes require new catalytic solutions. This brings new challenges to the field and increases the possibilities for greater efficiency and sustainability of such systems. This course provides the student with a global picture of catalysis as a multidisciplinary science, focusing on the most relevant concepts and challenges related to organic synthesis. Much emphasis is placed on the detailed understanding of the mechanism of chemical transformations and catalyst activity. This makes it possible to design catalysts with improved and tailored activity, and brings us closer to the ultimate goal of predicting the catalysts performance.

Thus, the main learning outcomes of this equipment include:

- To know the most relevant methods of organic synthesis based on catalytic processes, including stereoselective processes, being able to design routes of synthesis of complex organic molecules.
- To know and to understand the reaction mechanisms commonly accepted in organic chemistry and the methods available for their elucidation.
- To know the impact of Organic Chemistry in industry, environment, pharmacy, health, food and agriculture, and renewable energies.
- To be able to access to the required information (by mean of database, scientific papers, etc) and to acquire criterion enough for its interpretation and employment.



Asignatura: Procesos Catalíticos en Química Orgánica
 Código: 32539
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster universitario en Química Orgánica
 Nivel: 2
 Tipo: Optativa
 Nº de créditos: 3 ECTS

1.12. Contenidos del programa / Course contents

Introducción.

1. Catálisis: conceptos generales.
2. Tipos de catálisis.
3. Mecanismo general de catálisis. Actividad y selectividad de los catalizadores.
4. Importancia económica de la catálisis. Cuantificación del impacto medioambiental.

Catálisis organometálica.

1. Introducción.
2. Activación/funcionalización de enlaces inertes.
3. Hidrogenación, transferencia de hidrógeno, hidrofuncionalizaciones.
4. Activación π de sistemas insaturados.
5. Sistema ácido/base de Lewis en catálisis. Pares frustrados.

Organocatálisis.

1. Introducción a la organocatálisis.
2. Aminocatálisis asimétrica: activación vía enamina, dienamina, iminio y SOMO.
3. Interacciones no covalentes en organocatálisis: "protón quiral" y transferencia de fase.
4. Catálisis cooperativa y catálisis bifuncional.

Biocatálisis. Aplicaciones en síntesis orgánica

Introduction.

1. Catalysis: general concepts.
2. Types of catalysis.
3. General mechanism of catalysis. Activity and selectivity of the catalysts.
4. Economic importance of catalysis. Quantifying the environmental impact.

Organometallic catalysis.

1. Introduction.
2. Activation/functionalization of inert bonds.
3. Hydrogenation, hydrogen transfer, hydrofunctionalization.
4. Activation of unsaturated π systems.
5. Lewis acid/base systems. Frustrated pairs.

Organocatalysis.

1. Introduction to organocatalysis.
2. Asymmetric aminocatalysis: activation *via* enamine, dienamine, iminium and SOMO.
3. Non-covalent interactions in organocatalysis: "chiral proton" and phase transfer.
4. Bifunctional and cooperative catalysis.

Biocatalysis. Applications in organic synthesis.



Asignatura: Procesos Catalíticos en Química Orgánica
 Código: 32539
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster universitario en Química Orgánica
 Nivel: 2
 Tipo: Optativa
 Nº de créditos: 3 ECTS

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Bibliografía básica/basic bibliography

- *Homogeneous Catalysis: Understanding the art*, van Leeuwen P. W. N. M., Ed. Kluwer Academic Publishers, 2004.
- *Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules*, Hegedus L. S., Soderberg B. C. G., Eds. University Science Books, 3rd edition, 2009.
- *Organotransition Metal Chemistry: From Bonding to Catalysis*, Hartwig, J. F., Ed. Science Books, 2012.
- *Asymmetric Organocatalysis*, Berkessel A., Gröger. H., Ed., Wiley-VCH, 2005.
- *Biotransformations in Organic Chemistry*, Faber, K., Ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.

Bibliografía complementaria/complementary bibliography

- *Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds: A Comprehensive Handbook in Three Volumes*, Cornils, B., Herrmann, W. A., Eds., Wiley-VCH, 2nd edition, 2002; Cornils, B., Herrmann, W. A., Beller, M., Paciello, R., Eds., Wiley-VCH, 3rd edition, 2015.
- *The organic chemistry of enzyme-catalyzed reactions*, Silverman, R. B., Ed., Academic Press, 2002.
- *Biocatalysis in the Pharmaceutical and Biotechnology Industries*, Patel, R. N., Ed., Boca Raton, FL, 2007.
- *Fundamentals of Asymmetric Catalysis*, Walsh, P. J., Kozlowski, M. C., Eds., University Science Books, 2009.
- *New Frontiers in Asymmetric Catalysis*, Mikami, k., Lautens, M., Eds. Wiley-VCH, 2007.
- *Handbook of Green Chemistry, 3 Volume Set. Set I: Green Catalysis*, ANASTAS, P. T., set I; Crabtree R. H., Ed. Wiley-VCH, Weinheim, 2010.

1. Métodos docentes / Teaching methodology

1. Clases teóricas: Aproximadamente 20 horas.

En ellas se introducirán los principales conceptos y contenidos teóricos de la asignatura usando presentaciones en power-point y otras explicaciones adicionales en la pizarra. El contenido de cada tema estará bien planificado en cuanto a extensión y



Asignatura: Procesos Catalíticos en Química Orgánica
Código: 32539
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster universitario en Química Orgánica
Nivel: 2
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 3 ECTS

grado de profundidad de modo que se pueda fomentar la interacción con el estudiante mediante la formulación de preguntas de aplicación directa de los conceptos explicados y la resolución de dudas. Además se resolverán algunos problemas seleccionados de una colección de ejercicios, proporcionados a los estudiantes con la antelación suficiente para que los trabajen de manera autónoma y, así, puedan participar de su discusión posterior en clase.

1. In-class lectures: 24 hours approximately.

The key concepts and theory contents of the topic will be delivered by means of power point presentations and other additional explanations on the blackboard. The contents of each topic will be well-planned in relation with the extension and the degree of depth so that can promote interaction with the student through the formulation of questions about the direct application of explained concepts and doubts. In addition, some selected problems of a collection of exercises, provided previously provided to the students for their autonomous work in order they can participate in subsequent class discussion and resolution.

2. Actividades dirigidas

Trabajos individuales o en grupo que serán presentados en clase con una duración aproximada de 15 min y un turno posterior de discusión o preguntas, sobre el trabajo y la exposición, de unos 10 min cada uno.

Tutorías (Incluidas virtuales): Estas tutorías se realizarán de forma individual para la resolución de dudas o problemas concretos o para orientación sobre los trabajos o su exposición. También será posible la utilización del correo electrónico para la resolución de dudas y tutorías virtuales.

2. Supervised activities

Individual and/or group works will be presented in the classroom in 15-20 min sessions. The subsequent discussion about every work and the given talk will be then carried out for 10 min. Tutorials (including virtual ones): these tutorials will be carried out individually for the resolution of doubts or problems or for guidance on the work or its presentation. The use of the e-mail for the resolution of doubts and virtual tutoring will also be possible.



Asignatura: Procesos Catalíticos en Química Orgánica
 Código: 32539
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster universitario en Química Orgánica
 Nivel: 2
 Tipo: Optativa
 Nº de créditos: 3 ECTS

2. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

		Nº de horas/time	Porcentaje
Presencial	Clases teóricas y de ejercicios/ In-class lectures	20 h	35%
	Tutorías programadas/tutorial	2 h	
	Presentación oral/oral presentations*	2 h	
	Examen escrito/written exam	2 h	
No presencial	Elaboración de temas/preparation of topics	21 h	65%
	Preparación y estudio de actividades/preparation and study of activities	28 h	
Carga total de horas de trabajo/global workload: 25 hx 3 ECTS		75 h	

*El número de horas dedicadas las presentaciones orales podrá variar en función del número de alumnos matriculados en la asignatura/ The number of hours spent on the oral presentations may vary depending on the number of students registered in the course

3. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

A continuación se recoge un cuadro resumen con los porcentajes de las distintas actividades evaluables en la calificación final para poder aprobar la asignatura, tanto en la convocatoria ordinaria como en la extraordinaria.

Learning and training acquired by the student will be assessed throughout the course, trying to student progress regularly and consistently in the assimilation of the contents of the subject.

Below, a summary table with the percentages of the different assessment activities in the final grade to pass the course, both the ordinary and the extraordinary call.



Asignatura: Procesos Catalíticos en Química Orgánica
 Código: 32539
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster universitario en Química Orgánica
 Nivel: 2
 Tipo: Optativa
 Nº de créditos: 3 ECTS

Actividad evaluada/evaluated activity	Convocatoria ordinaria/ordinary session	Convocatoria extraordinaria/extraordinary session
Examen escrito/written exam	50%	50%
Presentación oral/oral presentation	40%	50%
Participación en seminarios/seminar participation	10%	
Total/total	100%	100%

Convocatoria ordinaria:

La calificación del examen escrito contribuirá con un 50% a la nota global. En la evaluación de los trabajos se tendrá en cuenta la calidad de la presentación, la organización de los contenidos, la claridad en las explicaciones y respuestas a las preguntas de los profesores y alumnos (40%). También se considerará la participación en clase en la resolución de ejercicios y la contribución a la discusión en las exposiciones orales (10%).

Ordinary session:

The rating of the written exam will contribute 50% to the overall mark. The evaluation of the work quality of the presentation will be taken into account, the organization of content, clarity of explanations and answers to questions from teachers and students (40%). Also it considers class participation in solving exercises and contribution to the discussion in the oral presentations (10%).

Convocatoria extraordinaria:

En caso de que el estudiante no supere la asignatura en convocatoria ordinaria deberá presentarse a la convocatoria extraordinaria. En esta convocatoria se realizará un examen escrito que contribuirá con un 50% a la nota global. El resto de la calificación (50%) corresponderá a la presentación oral de un trabajo preparado por el estudiante. Dicha calificación podrá corresponder al trabajo presentado anteriormente por el estudiante en la convocatoria ordinaria. En el caso de no haber realizado la presentación oral en la convocatoria ordinaria o a petición del profesor, si éste lo considerara oportuno, el alumno tendrá que realizar y exponer un trabajo en esta convocatoria extraordinaria.

Extraordinary session:

The student shall be submitted to the extraordinary call if fails in ordinary call. A written exam will contribute 50% to the overall mark in this call. The rest of the score (50%) will correspond to the oral presentation of a topic prepared by the student. This rating may correspond to the oral presentation performed by the student in the ordinary call. But, in the case of failure in the ordinary call or under request of the teacher, if the teacher thinks suitable, the student will have to carry out an oral presentation in this extraordinary call.



Asignatura: Procesos Catalíticos en Química Orgánica
 Código: 32539
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster universitario en Química Orgánica
 Nivel: 2
 Tipo: Optativa
 Nº de créditos: 3 ECTS

4. Cronograma* / Course calendar

Semana/ Week	Contenido/ Contents	Horas presenciales/ Contact hours	Horas no presenciales/ Independent study time
1	Clases de teoría (introducción y catálisis organometálica)/ <i>Theory hours (introduction and organometallic catalysis)</i>	6	9
1/2	Clases de teoría (catálisis organometálica)/ <i>Theory hours (organometallic catalysis)</i>	6	9
2	Clases de teoría (organocatálisis y biotransformaciones)/. <i>Theory hours (organocatalysis and biotransformations)</i>	8	10
3	Preparación del trabajo del estudiante/ <i>Preparation of student's work</i>	2*	21
4	Examen. <i>written exam</i>	2	

* El número de horas dedicadas las presentaciones orales podrá variar en función del número de alumnos matriculados en la asignatura/ The number of hours spent on the oral presentations may vary depending on the number of students registered in the course