

Ficha de Unidade Curricular MEQB

Unidade Curricular

Português

Processos de Catálise Homogénea

Inglês

Homogeneous Catalysis Processes

Total de horas

Teóricas

45

Teórico-práticas

Práticas Laboratoriais

Docente Responsável

Nome completo

Maria Paula Alves Robalo

Nº horas de contacto

45

Outros Docentes

Nome completo 1

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes)

Português

Após a aprovação na UC, o aluno deverá possuir a capacidade de:

1. Dominar todos os conceitos básicos relacionados com os complexos de metais de transição e distinguir a sua reactividade;
2. Identificar as principais classes de catalisadores homogéneos, bem como os seus processos de caracterização;
3. Conhecer e descrever os principais processos de interesse industrial na Indústria pesada e na Química Fina baseados neste tipo de catalisadores, nomeadamente: carbonilação, hidroformilação, hidrogenação, polimerização, oxidação, catálise assimétrica, reacções de acoplamento cruzado, metátese de alkenos, etc.;
4. Desenvolver o conhecimento na área dos catalisadores homogéneos de metais de transição, através da utilização das ferramentas de caracterização de compostos de coordenação, seguimento de reacções e estabelecimento dos critérios de escolha de catalisadores para determinado tipo de processo;
5. Conhecer as metodologias mais recentes para condições operacionais mais sustentáveis.

Inglês

The students will acquire the following specific knowledge and transferable skills:

1. Recognize and master the fundamental concepts related with metal transition complexes and distinguish their different reactivities;
2. Identify the main classes of metal transition homogeneous catalysts and their characterization methods;
3. Recognize and describe the main processes with industrial interest (commodity and fine chemicals) based on metal transition homogeneous catalysts: carbonylation, hydroformylation, hydrogenation, polymerization, oxidation, asymmetric catalysis, cross coupling reactions, alkene metathesis, etc.;
4. Develop the student critical thinking in the area of metal transition homogeneous catalysts, based on the knowledge of the tools for compounds characterization, reactions monitorization and the choice criteria for catalysts in a known process;
5. Knowledge on the recent methodologies for more sustainable processes.

Conteúdos programáticos

Português

1. Fundamentos de catálise homogénea. Propriedades importantes de metais e ligandos. Considerações energéticas - termodinâmica e cinética. Principais métodos de caracterização de novos compostos, de monitorização de reacções e escolha de novos catalisadores. Ciclo catalítico e aspectos mecanísticos. Requisitos de catalisadores homogéneos economicamente viáveis.
2. Catálise homogénea na indústria química. Factores importantes para o sucesso à escala industrial. Descrição dos ciclos catalíticos para processos industriais importantes: carbonilação, hidroformilação, hidrogenação, polimerização, oxidação, catálise assimétrica, reacções de acoplamento cruzado, metátese, etc.
3. Catálise homogénea e desenvolvimento sustentável. Exemplos industriais. Novas tendências em processos catalíticos homogéneos. Desenvolvimento de catalisadores com propriedades melhoradas: design de ligandos, promotores e heterogeneização de catalisadores. Estabelecimento de condições operacionais sustentáveis.

Inglês

1. Homogeneous catalysis fundamentals. Important properties for metals and ligands. Energetic considerations – kinetic and thermodynamic. Methods for new compounds characterization, reactions monitorization and choice for new homogeneous catalysts. Catalytic cycle and mechanistic aspects. Requirements for economically viable homogeneous catalysts.
2. Homogeneous catalysis and Chemical Industry. Study of the catalytic cycles of the most important industrial processes: carbonylation, hydroformylation, hydrogenation, polymerization, oxidation, asymmetric catalysis, cross coupling reactions, alkene metathesis, etc.
3. Homogeneous catalysis and Sustainable Development. Industrial examples. Research tendencies on homogeneous catalytic processes. Catalysts development with enhanced properties: ligand design, promoters and catalyst heterogeneization. Establishing more sustainable operational conditions.

Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular.

Português

Os objetivos da unidade curricular são concretizados através de aulas teóricas e elementos de apoio respectivos (slides e apresentações em "data-show"), acompanhadas da resolução de alguns exercícios de aplicação. Os conceitos apresentados em 1 visam dotar os alunos de conhecimentos gerais sobre os vários aspectos que permitem compreender o comportamento dos diversos tipos de catalisadores homogéneos baseados em metais de transição assim como a sua aplicação em processos industriais relevantes para a Indústria Pesada e Química Fina. A abordagem efectuada em 2 dos conteúdos programáticos pretende dar uma panorâmica geral dos processos industriais mais importantes baseados neste tipo de catalisadores homogéneos, tendo em conta os vários tipos de reacções assim como os problemas associados ao seu desenvolvimento em larga escala. Finalmente o tema 3 pretende introduzir uma perspectiva mais sustentável para estes processos industriais recorrendo a exemplos já implementados assim como as novas perspectivas e tendências desenvolvidas nesta área.

Inglês

The purposes of the course are achieved through lectures and respective support elements (slides and "data-show" presentations), accompanied by the resolution of some application problems. The concepts provided in 1 should offer to the students a general knowledge concerning the several important aspects in the understanding of the metal transition catalysts behavior and their application to the relevant industrial processes (commodity and fine chemicals). The approach taken in section 2 of syllabus provides a general overview of the most important industrial processes based on these type of catalysis with the different type reactions as well as the problems associated with full scale processes development. Finally section 3 introduces these industrial processes with a more sustainable perspective presenting some examples already implemented as well as the new perspectives and tendencies developed recently in this research area.

Metodologias de ensino (avaliação incluída)

Português

Metodologias expositivas para exploração de conceitos e teoria. A metodologia de ensino baseia-se na componente teórica (15 semanas) acompanhada de alguns exemplos práticos, correspondendo a 3 horas por semana, divididas em 1,5 h em dois dias da semana, perfazendo um total de horas de contato com o aluno de 45 horas. Durante estas aulas o envolvimento dos alunos e a sua participação ativa são estimuladas na resolução de exercícios práticos relacionados com os conhecimentos teóricos adquiridos.
A avaliação contínua inclui um trabalho de grupo sobre um tópico do programa, com apresentação e discussão oral onde se explora a capacidade dos alunos para apresentar um trabalho de pesquisa e um teste global individual. A avaliação por exame é composta por um exame final escrito e a apresentação do trabalho.
Avaliação contínua: Teste global (TG) ≥ 9.5 ; Trabalho de grupo (TP) ≥ 9.5
NF = 0.4 TP + 0.6TG
Avaliação por exame: Exame Final (EF) ≥ 9.5
NF = 0.4 (TP) + 0.6 (TG ou EF)
NF ≥ 9.5 (0-20)

Inglês

Expositive methodologies to explore concepts and theory. The teaching methodology is based on theoretical lectures (15 weeks), with some practical examples, corresponding to 3 hours by week, divided into 1.5 h in two days of the week, making a total of 45 contact hours. During the classes, the active participation of the students is stimulated through the resolution of practical exercises related with the theoretical knowledge acquired.
The continuous evaluation includes the oral presentation and discussion of a program topic (in group), where the capacity of the students to select, explore and present the topic is evaluated, as well as an individual global test. The evaluation by exam is made by a final written exam and a presentation of the program topic.
Continuous evaluation: Global Test (GT) ≥ 9.5 ; Group work (GW) ≥ 9.5
Final exam evaluation: Final Exam (FE): FE ≥ 9.5
Formula to obtain the final grade (FG): FG = 0.4 (GW) + 0.6 (GT or FE)
FG ≥ 9.5 (scale 0-20)

Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular.

Português

Os objetivos de aprendizagem da unidade curricular são alcançados através de metodologias de ensino expositivas e ativas. Os conteúdos programáticos são lecionados através da apresentação de um conjunto de diapositivos que são antecipadamente disponibilizados aos alunos permitindo que estes acompanhem a sua exposição retirando notas que considerem relevantes. Nas aulas mais expositivas é fomentada a participação dos alunos através da colocação de questões e exploração de temas de forma a fomentar a interação e estimulação do raciocínio. Os alunos são estimulados nas aulas a procurar informação noutras fontes bibliográficas nomeadamente livros, artigos científicos, via web of science ou b-on. Esta vertente de pesquisa é ainda explorada pelos alunos no desenvolvimento de um tópico dentro do programa da UC para exposição e discussão durante as aulas.
As metodologias de ensino seguidas nesta UC permitem aos alunos o desenvolvimento de competências de acordo com os objetivos da unidade curricular.

Inglês

The learning outcomes of the curricular unit are achieved by the use of expositive and active methodologies. The syllabus is lectured by the presentation of slides previously available to the students in order to facilitate the following of the lectures. In the more expositive classes the participation of the students is encouraged by the questioning procedure and exploration of topics as a way to promote the interaction between students and teacher. The students are also encouraged to search for information such as books, scientific and technical papers, via web of science or b-on. This subject is also explored by the students in the preparation of the program topic which should be presented and discussed.
The teaching methodologies used in the UC allow the students to develop skills according to the learning outcomes.

Bibliografia Principal

1. Steinborn, D., "Fundamentals of Organometallic Catalysis", Wiley-VCH, Weinheim, 2011.
2. Rothenberg, G., "Catalysis – Concepts and Green Applications", Wiley-VCH, Weinheim, 2008.
3. Behr, A., Neubert, P. "Applied Homogeneous Catalysis", Wiley-VCH, Weinheim, 2012.
4. Chiusoli, G.P., Maitlis, P.M. (Eds.), Metal-catalysis in Industrial Organic Processes, RSC Publishing, Cambridge, 2006.
5. Van Leeuwen, P.W.N.M., "Homogeneous Catalysis: understanding the art", Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2004
6. Collman, J.P., Hegedus, L.S., Norton, J.R., Finke, R.G., "Principle and Applications of Organotransition Metal Chemistry", University Science Books, 1st Ed., Mill Valley, 1987.