20-21

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA

QUÍMICA EN SUPERFICIES Y PRINCIPIOS DE CATÁLISIS HETEROGÉNEA

CÓDIGO 21151179

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
02009EC946F955595872BE175B9F94C9

20-21

QUÍMICA EN SUPERFICIES Y PRINCIPIOS DE CATÁLISIS HETEROGÉNEA

CÓDIGO 21151179

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

EQUIPO DOCENTE

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

CONTENIDOS

METODOLOGÍA

SISTEMA DE EVALUACIÓN

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/

02009EC946F955595872BE175B9F94C9

Nombre de la asignatura	QUÍMICA EN SUPERFICIES Y PRINCIPIOS DE CATÁLISIS HETEROGÉNEA
Código	21151179
Curso académico	2020/2021
Título en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 2
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

La asignatura “Química en Superficies y Principios de Catálisis Heterogénea” es una asignatura optativa dentro del módulo III. “Química Inorgánica y Química Técnica” del Master en Ciencia y Tecnología Química. Aunque esta asignatura está orientada a la iniciación en tareas de investigación, que podrán posteriormente completarse con el Doctorado, también presenta características de especialización académica y/o profesional como consecuencia de los contenidos que en ella se abordan.

Además dado su carácter fuertemente interdisciplinar resulta de gran interés formativo para licenciados o graduados en química, ingeniería química, ciencias ambientales, etc.
Al ser una asignatura optativa puede ser cursada con independencia del resto de asignaturas que se hayan elegido. Sin embargo, es recomendable elegir asignaturas del mismo módulo para conseguir una formación más especializada. Si se pretende optar por la realización de Doctorado es conveniente escoger asignaturas de otros profesores del grupo de investigación. Así, por ejemplo, esta asignatura puede ser complementaría con la de “Ingeniería Química Ambiental”, que se imparte en el primer cuatrimestre. En resumen esta asignatura pretende que el estudiante adquiera una visión amplia y multidisciplinar sobre las reacciones químicas que ocurren en las superficies de los sólidos, enfatizando en aspectos de caracterización de materiales y en aplicaciones industriales, medioambientales y de química sostenible.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

No existen requisitos previos para la realización de esta asignatura, que no sean los exigibles para la realización del posgrado en Ciencia y Tecnología Química. Ahora bien, dados los métodos de trabajo y los materiales que se van a utilizar en la asignatura, son indispensables unos conocimientos adecuados de Inglés científico y un nivel aceptable de manejo de informática como usuarios (correos electrónicos, páginas web, búsquedas en bases de datos, programas de cálculo y de gráficos, etc.).

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
02009EC946F955595872BE175B9F94C9

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos	ANTONIO R GUERRERO RUIZ (Coordinador de asignatura)
Correo Electrónico	aguerrero@ccia.uned.es
Teléfono	91398-7344
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	QUÍMICA INORGÁNICA Y QUÍMICA TÉCNICA

Nombre y Apellidos	ESTHER ASEDEGBEGA NIETO
Correo Electrónico	easedegbega@ccia.uned.es
Teléfono	91398-9546
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	QUÍMICA INORGÁNICA Y QUÍMICA TÉCNICA

Nombre y Apellidos	FRANCISCO IVARS BARCELO
Correo Electrónico	franciscoivars@ccia.uned.es
Teléfono	91398-7340
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	QUÍMICA INORGÁNICA Y QUÍMICA TÉCNICA

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

Tutorización personalizada unido a trabajo en equipo. Se utilizará para la comunicación la plataforma virtual educativa, aLF, pero sin descartar el correo electrónico directo con compromiso de atención en menos de 72 horas.
El horario de guardia semanal del equipo docente es:
Antonio Guerrero Ruiz: martes y jueves de 12:00 a 14:00
Esther Asedegbega Nieto: Martes de 15:00 a 19:00
Francisco Ivars Barcelo: Martes de 15:00 a 19:00

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS 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.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
02009EC946F955595872BE175B9F94C9

COMPETENCIAS GENERALES

CG02 - Desarrollar capacidad crítica y de evaluación

CG04 - Desarrollar capacidad creativa y de investigación

CG05 - Adquirir capacidad de organización y de decisión

CG06 - Comprender y manejar sistemáticamente los aspectos más importantes relacionados con un determinado campo de la química

CG07 - Dominar las habilidades y métodos de investigación relacionados con el campo de estudio

CG10 - Desarrollar la capacidad para proponer y llevar a cabo experimentos con la metodología adecuada, así como para extraer conclusiones y determinar nuevas líneas de investigación

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE01 - Desarrollar la habilidad y destreza necesarias en la experimentación química para aplicar sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos en el análisis químico

CE02 - Adquirir la capacidad de la utilización de variables que permiten obtener información químico-analítica.

CE03 - Analizar, interpretar y discutir los resultados obtenidos en la experimentación en el ámbito de la química.

CE04 - Manejar equipos e instrumentos especializados

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

El objetivo principal es introducir al estudiante en un campo de investigación e innovación científico-tecnológica nuevo, como son los procesos que ocurren en las interfases de los materiales. Dada la multidisciplinariedad de los conceptos que se abordan en esta asignatura, esta es especialmente interesante desde el punto de vista de la formación de pos-grado del estudiante. Este objetivo general se puede concretar en los siguientes puntos:

Conocer los métodos y técnicas que permiten un estudio científico de las reacciones que ocurren en las superficies de los sólidos.

Valorar en varios procesos químicos aplicados como y para que se utilizan catalizadores heterogéneos.

Calcular mediante ejercicios numéricos y conceptuales como un catalizador altera la velocidad o especificidad de una reacción.

Elegir el catalizador más adecuado para una determinada aplicación basándose en la información de la asignatura y en el análisis de la bibliografía pertinente.

Reconocer el impacto en el contexto industrial, tecnológico, de las aplicaciones de la Química de Superficies, con especial énfasis en la producción sostenible de compuestos químicos y en la eliminación de contaminantes.

Desarrollar en el estudiante una visión global sobre el estado actual del conocimiento científico y sobre las líneas de investigación e innovación que se están produciendo en la actualidad en relación con los contenidos de la asignatura.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
02009EC946F955595872BE175B9F94C9

CONTENIDOS

Tema 1. Principios básicos de la Catálisis

1.1. Definición de catalizador.
1.2. Parámetros de control en una reacción catalizada: actividad, selectividad y estabilidad.
1.3. Cinética de los procesos catalíticos.
1.4. Tipos de catalizadores: homogéneos, heterogéneos y biocatalizadores.
1.5. Clasificación de los catalizadores heterogéneos: metálicos y bimetálicos, óxidos y sulfuros semiconductores, óxidos aislantes, sólidos con propiedades superficiales ácidas o básicas.
1.6. Catalizadores bifuncionales. Soportes y fases activas.
1.7. Ejemplos de procesos industriales donde se aplican catalizadores heterogéneos: desde las grandes petroquímicas hasta la química sostenible, desde la química fina hacia la síntesis de fármacos.
1.8. La catálisis como ciencia multidisciplinar: índice de los conceptos cinéticos, termodinámicos y mecanismos de reacción que se aplican en el desarrollo de un catalizador.
1.9. El catalizador como transición desde la física del estado sólido hacia los conceptos de química supramolecular.
1.10. Química organometálica de superficies.

Tema 2. Consideraciones fundamentales sobre la dinámica y las estructuras de las fases adsorbidas

2.1. Adsorción de moléculas en superficies sólidas. Isotermas de adsorción, área superficial y porosidad.
2.2. Quimisorción sobre superficies metálicas e interacciones gas-óxido.
2.3. Aspectos cuantitativos de la catálisis por metales.
2.4. Naturaleza de los sitios activos expuestos en las superficies de los sólidos.
2.5. Estructura, preparación y uso de los catalizadores heterogéneos.
2.6. Nanopartículas como catalizadores monofuncionales.
2.7. Envenenamiento, promoción y desactivación de catalizadores selectivos.
2.8. Naturaleza química de los sitios activos. Ejemplos de casos como: zeolitas, sólidos micro- y mesoporosos, arcillas con pilares, sólidos superácidos, materiales carbonosos, óxidos metálicos mixtos (molibdatos, perovskitas, espinelas).

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
02009EC946F955595872BE175B9F94C9

Tema 3. Técnicas y métodos de estudio para Química en Superficies

3.1. Introducción.
3.2. Estabilidad de los catalizadores sólidos.
3.3. Área superficial y porosidad.
3.4. Naturaleza y fuerza de los centros activos.
3.5. Uso de isótopos en el seguimiento de las reactividades superficiales.
3.6. Ejemplos de métodos químicos de detección de especies e intermedios en superficies: desorción a temperatura programada, determinaciones calorimétricas, métodos “in situ” con aplicación técnicas espectroscópicas. Caso de los carbonilos seguidos por FTIR.
3.7. Ejemplos de técnicas físicas aplicadas a superficies: XRD, AES, XPS, SIMS, EXAFS, XANES, NMR, STM, AFM, TEM.
3.8. Experimentación con resolución temporal: ejemplos de mecanismos de reacción seguidos mediante un reactor TAP (Temporal Analysis of Products).

Tema 4. Principios y aplicaciones donde se relacionan la Química de Superficies con los procesos catalizados por sólidos

4.1. Ejemplos clásicos de aplicaciones industriales: síntesis del metanol, Fischer-Tropsch, reformado de metano con vapor de agua.
4.2. Los catalizadores en varios escenarios del sector energético. Combustibles sintéticos. Pilas de combustible.
4.3. La industria de los abonos: síntesis del amoniaco y oxidación del dióxido de azufre.
4.4. La industria de los derivados del petróleo: hidrotratamientos, catalizadores de oxidación, reacciones con sólidos ácidos, hidrogenolisis, isomerización, aluminosilicatos.
4.5. Hidrogenación de enlaces múltiples carbono-carbono. Ejemplos de química fina.
4.6. Catalizadores para el control de la contaminación. Ejemplos sobre descontaminación de aguas fluviales, freáticas y de desecho industrial. La eliminación de gases tóxicos, caso de los catalizadores de tres vías.
4.7. Ejemplos de catalizadores para conseguir una industria química sostenible.
4.8. Fotocatalizadores y electrocatálisis.

METODOLOGÍA

La atención del estudiante durante la duración del curso consistirá en una tutorización personalizada y en el trabajo en equipo. Tras el estudio del material que se proporcionará por el profesor al estudiante, se utilizará para la comunicación la plataforma virtual educativa, aLF, pero sin descartar el correo electrónico directo con compromiso de atención en menos de 72 horas. Es por tanto fundamental que todos los estudiantes matriculados en la asignatura entren en la plataforma virtual y se pongan en contacto con el profesor en los

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
02009EC946F955595872BE175B9F94C9

primeros días del curso, máximo en una semana. Esto facilitará el envío del material de estudio necesario para ir progresando en el curso.
El estudiante, en la plataforma virtual, podrá intercambiar información tanto con los compañeros como con el equipo docente. Allí encontrará los objetivos, la bibliográfica y los ejercicios.
El tiempo programado para la entrega de los ejercicios resueltos se indicará en el curso virtual al introducir dicha actividad. Una vez finalizado dicho plazo se expondrán las soluciones comentadas, que podrán ser discutidas en los correspondientes foros de la plataforma aLF. De las respuestas recibidas de cada estudiante se derivará una evaluación continua del mismo, que no será publicada.
De forma resumida en la planificación de la asignatura se procurará ser flexible, y adaptarse a las necesidades del grupo, en general, y de cada estudiante en particular. Así pretendemos que lo que se aprenda esté relacionado con los intereses de los estudiantes.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen: No hay prueba presencial

CARACTERÍSTICAS DE LA PRUEBA PRESENCIAL Y/O LOS TRABAJOS

Requiere Presencialidad: No

Descripción

En esta asignatura no habrá examen presencial final.

Criterios de evaluación

La evaluación se hará a partir de las dos actividades propuestas a través de la plataforma aLF.

Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final: Cada una de las dos actividades propuestas contribuye con un 45% de la calificación final.

Fecha aproximada de entrega: Las fechas aproximadas de entrega serán 23/04/2021 y 11/06/2021 para la convocatoria de junio y 31/08/2021 y 15/09/2021 para la convocatoria de septiembre

Comentarios y observaciones

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC?: No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación de la PEC en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
02009EC946F955595872BE175B9F94C9

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? Si,no presencial

Descripción

Participación activa en los foros

Criterios de evaluación

Ponderación en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

Ambas actividades evaluables contribuyen como máximo hasta un 45% de la nota final. La participación en los foros sumará hasta 10% en la calificación final.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Título: CONCEPTS OF MODERN CATALYSIS AND KINETICS (2003. ISBN: 3-527-30574-2)

Autor/es: Niemantsverdriet, J.W. ; Chorkendorff, I. ;

Editorial: Wiley-VCH Editions

Título: HETEROGENEOUS CATALYSIS: PRINCIPLES AND APPLICATIONS (1987. ISBN: 0-19-855525-3)

Autor/es: Bond, G.C. ;

Editorial: Oxford Science Publications

Título: PRINCIPLES AND PRACTICE OF HETEROGENEOUS CATALYSIS (1997. ISBN: 3-527-29239-X)

Autor/es: Thomas ; Thomas, W.J. ; J.M. ;

Editorial: VCH Editions

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

El equipo docente proveerá a los alumnos de materiales para el estudio de los temas fundamentales de esta asignatura. Por ello es conveniente visitar en el portal de la UNED, plataforma alF, durante los primeros días de desarrollo del curso, para recuperar esta información. Si tienen dudas sobre los envíos pueden escribir por correo electrónico directamente a:

aguerrero@ccia.uned.es

easedegbega@ccia.uned.es

franciscoivars@ccia.uned.es

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/

02009EC946F955595872BE175B9F94C9

Recursos on-line complementarios:
Acceso a través de la Biblioteca de la UNED a las bases de datos, por ejemplo ISI Web Knowledge. Asimismo se facilitarán páginas Web actualizadas donde encontrar recursos adecuados a la asignatura.

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
02009EC946F955595872BE175B9F94C9