

QUÍMICA EN SUPERFICIES Y PRINCIPIOS DE CATÁLISIS HETEROGÉNEA

Curso 2010/2011

(Código:21151179)

1. PRESENTACIÓN

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.

2. CONTEXTUALIZACIÓN

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 complementaria 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.

3. REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

No existen requisitos previos para la realización de esta asignatura, que no sean los exigibles para la realización del posgrado en Ciencia y Tecnología Químicas. 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.).

4. 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.

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

A partir de las competencias y objetivos antes detallados, hemos definido una serie de temas, desglosados por hitos concretos, sobre los que cada estudiante trabajará bajo la tutela directa y continua del profesor de la asignatura. Estos contenidos son:

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).

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 amoníaco 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.

6.EQUIPO DOCENTE

DATOS NO DISPONIBLES POR OBSOLESCENCIA

7.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 si 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 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.

8.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

LIBRO ACTUALMENTE NO PUBLICADO

ISBN(13):

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

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

Editorial: Wiley-VCH Editions

LIBRO ACTUALMENTE NO PUBLICADO

ISBN(13):

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

Autor/es: Bond, G.C. ;

Editorial: Oxford Science Publications

LIBRO ACTUALMENTE NO PUBLICADO

ISBN(13):

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

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

Editorial: VCH Editions

9.BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

10.RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

El equipo docente proveerá a los alumnos de materiales para el estudio de los temas fundamentales de esta asignatura. Por ello es conveniente enviar al profesor las direcciones de correo postal en los primeros días de desarrollo del curso. Dichos envíos se pueden realizar por correo electrónico a: aguerrero@ccia.uned.es

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.

11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

Tutorización personalizada unido a trabajo en equipo. Se utilizará para la comunicación la plataforma virtual educativa, ALF, pero si descartar el correo electrónico directo con compromiso de atención en menos de 72 horas

12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

Los elementos de evaluación, que por otra parte será continua, se basarán en las respuestas a los ejercicios propuestos. Asimismo se tendrá en cuenta la actividad en el curso virtual. También se propondrán la realización de informes, búsquedas bibliográficas y trabajos sobre algún proceso o técnica concreta. Como criterios numéricos un 40% de la nota se basará en los ejercicios propuestos-resueltos on-line, un 30% en las actividades y participaciones en la tutoría virtual y otro 30% en los informes y trabajos personales. Sin embargo, si uno o varios de estos tres aspectos no son atendidos adecuadamente por el estudiante será potestad del profesor el proponer un ejercicio escrito presencial para la valoración final de la asignatura. A este ejercicio podrán acceder también los estudiantes que no hayan conseguido un 5 sobre 10 de puntuación.



13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

