



Grado en Ingeniería Química 29940 - Catálisis y procesos catalíticos de interés industrial

Guía docente para el curso 2013 - 2014

Curso: 4, Semestre: 2, Créditos: 6.0

Información básica

Profesores

- **María Reyes Mallada Viana** rmallada@unizar.es

- **Fernando Viguri Rojo** fviguri@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Para cursar la asignatura de Catálisis y Procesos Catalíticos de Interés Industrial se recomienda haber cursado las asignaturas de Química, Ampliación de Química I, Ampliación de Química II, Transferencia de Materia, Cinética Química Aplicada, Diseño de Reactores y Química Industrial.

La asistencia a clase, el estudio continuado y el trabajo día a día son fundamentales para que el alumno alcance de manera satisfactoria el aprendizaje propuesto. Los estudiantes deben tener en cuenta que para su asesoramiento dispone del profesor en tutorías personalizadas y grupales.

Actividades y fechas clave de la asignatura

Las 150 horas de trabajo del alumno se repartirán en actividades del siguiente modo:

- 40 horas de clase magistral en las que se expondrán los contenidos teóricos y resolución de problemas modelo.
- 13 horas de resolución de problemas y casos. El alumno resolverá en clase supervisado por el profesor problemas y casos prácticos relacionados con las clases teóricas.
- 7 horas de laboratorio donde se realiza una experiencia de catálisis relacionada con los contenidos teóricos de la asignatura.
- 15 horas de trabajos tutelados que consistirán en la realización de tareas de desarrollo, ampliación, documentación, resolución... de casos propuestos por el profesor, basados en los conceptos vistos en el aula. Estos trabajos estarán distribuidos durante el curso, serán de realización individual o en grupo pequeño (2-3 alumnos) y se plasmarán en un entregable que será corregido y calificado.
- 71 horas de estudio personal, repartidas a lo largo de todo el semestre.
- 4 horas de examen, correspondientes al examen global cuya fecha será fijada por la EINA.

En la página web del centro EINA se puede consultar el calendario académico, los horarios y aulas de las clases presenciales. La relación de fechas y actividades concretas, así como todo tipo de información y documentación sobre la asignatura, se publicará en el Anillo Digital Docente (para el acceso a esta web, el estudiante deberá estar matriculado en la asignatura).

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

- 1:** Conoce los sistemas catalíticos de interés industrial y tecnológico.
- 2:** Conoce y aplica las técnicas de análisis, diseño y optimización energética a equipos e instalaciones propias de la industria química.
- 3:** Conoce la caracterización básica de sólidos y su acondicionamiento para la industria química.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

El campo de estudio de la asignatura es la catálisis. La asignatura comienza con un bloque de introducción y otros dos bloques dedicados al estudio de los conceptos básicos en catálisis homogénea y heterogénea.

El bloque central presenta dos partes, en la primera se describen las reacciones y los mecanismos de reacción de procesos catalíticos homogéneos más importantes desde el punto de vista industrial, como hidrogenación, carbonilación, polimerización, oxidación y metátesis. En la segunda parte, centrada en la catálisis heterogénea, se analiza la estructura de las partículas catalíticas, los diversos materiales catalíticos, sus propiedades y sus métodos de preparación y de caracterización. Finalmente, se estudia la desactivación catalítica, su regeneración y se examinan los procesos catalíticos industriales más importantes.

Se dedica el último bloque de la asignatura al estudio de las nuevas tendencias tanto en catálisis homogénea como heterogénea.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

Se pretende que el alumno adquiera los conceptos fundamentales de la catálisis, conozca los sistemas catalíticos (homogéneos y heterogéneos) más importantes desde el punto de vista industrial, y sea capaz de realizar reacciones catalíticas en el laboratorio.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura de Catálisis y Procesos Catalíticos de Interés Industrial pertenece al módulo de Formación Optativa de la Titulación. Cuando se imparte esta materia, segundo semestre del cuarto curso, el alumno ya ha cursado las asignaturas obligatorias de la Titulación, por lo tanto ya maneja los principios fundamentales de la Ingeniería Química. Los conocimientos adquiridos previamente serán fundamentales para abordar el estudio de los sistemas catalíticos que se incluyen dentro de esta materia, con rigor y eficacia. Esta asignatura proporcionará al alumno herramientas que podrá utilizar, en el estudio de otras materias optativas de la titulación, como por ejemplo en la asignatura de Polimerización, y además, le permitirá adquirir conceptos esenciales para el desarrollo de su profesión como ingeniero químico.

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

1:

Competencias Genéricas

- Capacidad para combinar los conocimientos básicos y los especializados de ingeniería para generar propuestas innovadoras y competitivas en la actividad profesional.
- Capacidad para resolver problemas y tomar decisiones con iniciativa, creatividad y razonamiento crítico.
- Capacidad para aplicar las tecnologías de la información y las comunicaciones en ingeniería.
- Capacidad para comunicar y transmitir conocimientos, habilidades y destrezas en castellano.
- Capacidad para aprender de forma continuada y desarrollar estrategias de aprendizaje autónomo.

2:

Competencias Específicas

- Capacidad para el diseño y operación de instalaciones propias de la industria química.

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

Los resultados de aprendizaje que se obtienen en esta asignatura son importantes ya que le permitirán al alumno conocer y analizar los procesos catalíticos más importantes desde el punto de vista industrial. Estos conocimientos adquiridos son fundamentales para que, en el futuro, el estudiante desempeñe de manera satisfactoria su actividad profesional.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

1:

Opción 1:

La evaluación es global y comprende:

1. Realización de los problemas y casos propuestos durante el desarrollo de la asignatura.
2. Realización de trabajos tutelados. Los entregables correspondientes a trabajos tutelados (del orden de 2-3 tareas por curso), serán calificados valorándose su contenido, la comprensión de los conceptos que en ellos se demuestre y la correcta presentación (habitualmente será escrita, pero opcionalmente alguna de ellas puede serlo de forma oral).
3. Realización de una práctica de laboratorio. En la realización de la experiencia de catálisis se valorará el desarrollo de la misma en el laboratorio y la presentación e interpretación de los resultados.
4. Realización de un examen al finalizar la asignatura. Esta prueba constará de: (a) preguntas y cuestiones teórico-prácticas razonadas en la que se pedirá la aplicación de la teoría a casos y ejemplos concretos, y (b) de la resolución de problemas.

La nota de la asignatura se calculará según la siguiente fórmula:

Nota = 0,4.(Nota de trabajo del alumno) + 0,6.(Nota del examen), siendo la Nota del trabajo del alumno el promedio de las calificaciones de las actividades de evaluación 1, 2 y 3 (Problemas, Trabajos tutelados y Práctica).

Se precisa una nota mínima de 4,0 sobre 10 en el examen para superar la asignatura.

2:

Opción 2:

Aquellos alumnos que no quieran seguir la evaluación de la opción 1, pueden optar por presentarse al examen de convocatoria (100% de la nota final) de similares características que el examen final de la opción 1.

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

El proceso de aprendizaje se desarrollará en varios niveles: clases magistrales, resolución de problemas (casos), práctica de laboratorio y trabajos tutelados, siendo creciente el nivel de participación del estudiante. En las clases de teoría se van a ir desarrollando las bases teóricas que conforman la asignatura y resolviendo algunos problemas modelo. Las clases de problemas y casos y las prácticas de laboratorio son el complemento eficaz de las clases magistrales, ya que permiten verificar la comprensión de la materia y a su vez contribuyen a desarrollar en el alumno un punto de vista más aplicado. Finalmente los trabajos tutelados complementarán todo lo anterior.

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

- 1:** **Clases magistrales** (40 h) donde se impartirá la teoría de los distintos temas que se han propuesto y se resolverán en la pizarra problemas modelo.
- 2:** **Clases presenciales de resolución de problemas y casos** (13 h). En estas clases se resolverán problemas por parte del alumno supervisado por el profesor. Los problemas o casos estarán relacionados con la parte teórica explicada en las clases magistrales.
- 3:** **Clases de laboratorio** (7 h) donde el alumno afianzará los contenidos desarrollados en las clases magistrales.
- 4:** **Trabajos tutelados** (15 h no presenciales), individuales ó en grupo. Se propondrán 2 ó 3 actividades que serán tuteladas por los profesores.
- 5:** **Estudio individual** (71 h no presenciales). Se recomienda al alumno que realice el estudio individual de forma continuada a lo largo del semestre.
- 6:** **Evaluación final** (4 h). Se realizara una prueba global donde se evaluarán los conocimientos teóricos y prácticos alcanzados por el alumno.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Las clases magistrales y de resolución problemas se imparten según horario establecido por la EINA además cada profesor informará de su horario de atención de tutorías. El temario es el siguiente:

Introducción:

Tema 1. Introducción a la catálisis: Conceptos básicos. Economía atómica. Selectividad en procesos catalíticos. Tipos de catálisis. (2 h, teoría + problemas).

Tema 2. Catálisis homogénea: Características de los Catalizadores. Reacciones fundamentales y mecanismos de reacción: Reacciones de sustitución, reacciones de adición oxidante y eliminación reductora, reacciones de inserción y eliminación, y reacciones de ataque a los ligandos coordinados. (6 h, teoría + problemas).

Tema 3. Catálisis heterogénea: Estructura y textura de las partículas catalíticas. Etapas en la reacción catalítica. Diagnóstico del funcionamiento del catalizador. (3 h, teoría + problemas)

Catálisis homogénea:

Tema 4. Hidrogenación. (10 h, teoría + problemas (3) + prácticas (7 h)).

Tema 5. Carbonilación: Síntesis del Ácido acético, Hidroformilación. (4 h, teoría + problemas).

Tema 6. Polimerización. Catalizador de Ziegler-Natta. (3 h, teoría + problemas).

Tema 7. Reacciones de Oxidación, Metátesis, Acoplamiento carbono-carbono. (3 h, teoría).

Catálisis heterogénea:

Tema 8.- Estructura del catalizador: diseño. Componentes activos. Soportes. Promotores. Ejemplos. (2 h, teoría + problemas)

Tema 9.- Materiales catalíticos: Tipos. Metales. Semiconductores. Aislantes y sólidos ácidos: alúmina, arcillas, sílice-alúmina, zeolitas... (3 h, teoría + problemas)

Tema 10.- Preparación de catalizadores: Componentes activos simples y soportes. Óxidos dobles. Deposición. Extracción. Conformado. Resistencia mecánica. (3 h, teoría + problemas).

Tema 11.- Caracterización de catalizadores: Propiedades del material. Propiedades de las partículas. Propiedades de la superficie. Actividad. (3 h, teoría + problemas)

Tema 12.- Desactivación: Concepto. Ensuciamiento. Envenenamiento. Sinterización. Otras causas. Cinética. Regeneración. (6 h, teoría + problemas)

Tema 13.- Catálisis heterogénea en la industria: Inorgánica base, refinado de petróleo, procesamiento de carbón y gas natural, fine chemicals..., Reactores catalíticos. (4 h, teoría + problemas)

Tema 14.- Catálisis heterogénea en energía y medio ambiente: emisiones automoción, fuentes estacionarias, tratamiento aguas, fotocatalisis, fuel cells, ... Reactores catalíticos. (4 h, teoría + problemas)

Nuevas tendencias:

Tema 15: Nuevas tendencias en catálisis homogénea: fuentes, reacciones, catalizadores, métodos. (2 h, teoría + trabajo).

Tema 16: Nuevas tendencias en catálisis heterogénea. (2 h, teoría + problemas).

BIBLIOGRAFIA

- *Applied Homogeneous Catalysis*; Behr, A.; Neubert, P.; Wiley-VCH, **2012**.
- *Fundamentos y Aplicaciones de la Catálisis Homogénea*; Eds. Oro, L. A.; Sola, E.; Pub. Universidad de Zaragoza, **2000**.
- *Metal-Catalysis in Industrial Organic Processes*; Chiusoli, G. P.; Maitlis, P. M.; RSC Publishing, **2006**.
- *Industrial Catalysis: a practical approach*; Hagen, J.; Wiley-VCH, **2006**.
- *Catalysis, Concepts and Green Applications*; G. Rothenberg; Wiley-VCH, **2008**.
- *Homogeneous catalysis: mechanism and Industrial applications*; Bhaduri, S.; Mukesh, D.; New York, Wiley-Interscience, **2000**.
- *Homogeneous Catalysis. Understanding the Art*; Van Leeuwen, P. W. N. M.; Dordrecht, Kluwer Publishers, **2004**.
- *Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds*; Cornils, B.; Hermann, W. A.; Wiley-VCH, **2002**.

- *Handbook of Heterogeneous Catalysis*; G. Ertl, H. Knözinger, F. Schüth, J. Weitkamp, (eds.); Wiley-VCH, Weinheim, **2008**.
- *Principles of catalysis development*, Richardson, J.T., Plenum Press, **1992**.
- *Fundamentals of Industrial Catalytic Processes*; Bartholomew, C. H., Farrauto, R. J, John Wiley, **2006**.
- *Heterogeneous Catalysis in Industrial Practice*; C.N. Satterfield; Krieger Publishing Co.; **1996**.
- *Novel Concepts in Catalysis and Chemical Reactors. Improving the Efficiency for the Future*; A.Cybulski, J. A. Moulijn, A. Stankiewicz; WILEY-VCH Verlag & Co. KGaA; **2010**.

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Applied homogeneous catalysis with organometallic compounds : a comprehensive handbook in two volumes / edited by Boy Cornils and Wolfgang A. Herrmann Weinheim : Wiley-VCH, cop. 2000
- Bartholomew, Calvin H.. Fundamentals of industrial catalytic processes / Calvin H. Bartholomew, Robert J. Farrauto . - 2nd ed. Hoboken, New Jersey : Wiley, cop. 2006
- Behr, Arno. Applied homogeneous catalysis / Arno Behr and Peter Neubert Weinheim : Wiley-VCH, cop. 2012
- Bhaduri, Sumit. Homogeneous catalysis : mechanisms and industrial applications / Sumit Bhaduri, Doble Mukesh New York [etc.] : Wiley-Interscience, 2000
- Fundamentos y aplicaciones de la catálisis homogénea / editado por Luis A. Oro y Eduardo Sola . 2ª ed. Zaragoza : Luis A. Oro y Eduardo Sola, 2000
- Hagen, Jens. Industrial catalysis : a practical approach / Jens Hagen. 2nd completely rev. and extended ed. Weinheim : Wiley-VCH, cop. 2006
- Handbook of heterogeneous catalysis / edited by G. Ertl ... [et al.] . - 2nd comp. rev. and enl. ed. Weinheim : Wiley-VCH, cop. 2008
- Leeuwen, Piet W. N. M. van. Homogeneous catalysis : understanding the art / Piet W.N.M. van Leeuwen Dordrecht [etc.] : Kluwer Academic Publishers, 2004
- Metal-catalysis in industrial organic processes / edited by Gian Paolo Chiusoli, Peter M. Maitlis . - Softback ed. Cambridge : Royal Society of Chemistry, cop. 2008
- Novel concepts in catalysis and chemical reactors : improving the efficiency for the future / edited by Andrzej Cybulski, Jacob A. Moulijn, and Andrzej Stankiewicz Weinheim (Germany) : Wiley-VCH, cop. 2010
- Richardson, James Thomas. Principles of catalyst development / James T. Richardson . - 2nd pr. New York ; London : Plenum Press, 1992
- Rothenberg, Gadi. Catalysis : concepts and green applications / Gadi Rothenberg Weinheim : Wiley-VCH, cop. 2008
- Satterfield, Charles N.. Heterogeneous catalysis in industrial practice / Charles N. Satterfield . - 2nd. ed, [repr. with corrections] Malabar, Florida : Krieger Publishing Company , 1991 [reimpr. 1996]