



Máster en Química Sostenible 66201 - Catálisis

Guía docente para el curso 2013 - 2014

Curso: 1, Semestre: 0, Créditos: 6.0

Información básica

Profesores

- **Francisco José Fernández Álvarez** paco@unizar.es
- **Clara Isabel Herrerías Larripa** clarah@unizar.es
- **Silvia Irusta Alderete** sirusta@unizar.es
- **Jesús Julián Pérez Torrente** perez@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

La asignatura está dividida en dos bloques temáticos, correspondientes a Catálisis Homogénea (Luis A. Oro, Jesús J. Pérez) y Catálisis Heterogénea (Clara I. Herrerías, Silvia Irusta, Antonio Monzón). Se recomienda estudiar desde el primer día de docencia.

Actividades y fechas clave de la asignatura

Con carácter orientativo, se propone el siguiente calendario:

16 de diciembre: Prueba escrita de Catálisis Homogénea

11 de febrero: Prueba escrita de Catálisis Heterogénea 1

11 de febrero: Prueba escrita de Catálisis Heterogénea 2

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

1: Identifica las ventajas e inconvenientes del uso industrial de catalizadores.

2:

Identifica los principales tipos de reacciones homogéneas, sus mecanismos y sus aplicaciones industriales.

- 3:** Explica la importancia de la catálisis en la reducción de residuos y la mejora de la eficiencia de los procesos.
- 4:** Evalúa la actividad y selectividad de los catalizadores.
- 5:** Reconoce las líneas de investigación actuales en Catálisis Homogénea.
- 6:** Identifica los principios que controlan el mecanismo y la cinética de las reacciones catalíticas heterogéneas.
- 7:** Describe los métodos de obtención y caracterización de catalizadores heterogéneos.
- 8:** Identifica las principales aplicaciones industriales de los catalizadores heterogéneos.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Un catalizador es una sustancia que facilita una reacción química sin consumirse en el proceso. El uso de catalizadores permite la optimización del uso de los recursos disponibles y la minimización de los residuos, dos objetivos fundamentales de la Química Sostenible.

Desde un punto de vista operativo, los catalizadores se clasifican en homogéneos y heterogéneos. Así, en la catálisis homogénea, el catalizador está situado en la misma fase que los reactivos y los productos, mientras que en la catálisis heterogénea ocupan distintas fases. Los catalizadores homogéneos más interesantes son habitualmente complejos de metales de transición.

Aunque los catalizadores homogéneos conducen a menudo a altos rendimientos, a menudo plantean problemas en cuanto a su separación respecto a la fase de los productos de reacción. Así, los catalizadores heterogéneos en estado sólido se separan con facilidad de los productos líquidos por filtración o, de los gases de forma espontánea.

La asignatura de Catálisis se imparte por bloques temáticos en el primer semestre del curso, de forma que en el primer trimestre se imparte el bloque de Catálisis Homogénea y en el segundo, se imparte el correspondiente a Catálisis Heterogénea. Esta organización permite introducir un grado creciente de complejidad en los conceptos implicados.

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:

La docencia de la asignatura de Catálisis permite el desarrollo de numerosas competencias específicas del máster, entre las que pueden destacarse las siguientes:

- Evaluar el grado de riesgo de un proceso o reacción química y la toxicidad de los compuestos implicados
- Identificar los principales obstáculos a la implantación de las distintas técnicas de Química Sostenible
- Diseñar la modificación o sustitución de procesos químicos por otros menos dañinos con el medioambiente basándose en técnicas específicas en Química Sostenible

La docencia de la asignatura se imparte en dos bloques temáticos, correspondientes a Catálisis Homogénea y Catálisis

Heterogénea, impartidos respectivamente el primer y segundo trimestre del curso.

Las actividades docentes programadas permitirán desarrollar de distintas competencias básicas, entre las que puede destacarse:

-Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas con entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio

Además, estas actividades docentes permitirán el desarrollo de las siguientes competencias transversales del máster:

-Obtener información de distintos tipos de fuentes y evaluar su fiabilidad

-Ordenar, analizar críticamente y sintetizar información

-Comprender informes y conferencias en inglés

-Formular, analizar, evaluar y comparar soluciones nuevas o alternativas para distintos problemas

-Desarrollar capacidad para la crítica y la autocrítica

-Usar de forma efectiva las tecnologías de la información y de las comunicaciones

-Gestionar de forma adecuada los recursos y el tiempo disponibles

-Transmitir información de forma oral, escrita o gráfica usando herramientas de presentación adecuadas

-Desarrollar capacidades de gestión (toma de decisiones, establecimiento de objetivos, definición de problemas, diseño y evaluación)

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La potenciación de la catálisis constituye uno de los 12 principios de la Química Sostenible propuestos por Anastas y Warner. El desarrollo de las competencias relacionadas con esta disciplina constituye un requisito imprescindible para diseñar de reacciones químicas más eficientes y con menor consumo de energía, asuntos de gran importancia en la Industria Química actual.

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

- 1:** Seleccionar catalizadores homogéneos para llevar a cabo reacciones de interés industrial.
- 2:** Diseñar catalizadores heterogéneos para llevar a cabo reacciones químicas.

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

Se calcula que el 90% de los productos químicos industriales se obtiene mediante el uso de catalizadores.

En 2005, los procesos catalíticos produjeron productos por un valor de unos 900 mil millones de dólares.

El uso de catalizadores constituye el octavo principio de la Química Sostenible, según Paul Anastas. A pesar de que el uso de catalizadores está ya muy extendido en la Industria Química, la implantación de la Química Sostenible debería conducir a una mayor eficiencia de los procesos implicados. La formación proporcionada por esta asignatura deberá permitir el diseño de catalizadores más eficientes para la Industria Química.

Evaluación

Actividades de evaluación

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

1: Pruebas escritas de preguntas de respuesta breve y problemas

Se realizarán tres pruebas, correspondientes a Catálisis Homogénea, Catálisis Heterogénea 1 y Catálisis Heterogénea 2. Las ponderaciones de estas pruebas en la calificación total de la asignatura son Catálisis Homogénea 50%, Catálisis Heterogénea 1 25% y Catálisis Heterogénea 2 25%. En estas pruebas se valorará la capacidad del estudiante para exponer los conocimientos adquiridos y aplicarlos a la resolución de problemas concretos.

2: Prueba global

Para cada convocatoria oficial, se realizará una prueba global de la asignatura en la fecha prevista en el calendario académico del máster. Podrá presentarse a dicha prueba global todo estudiante que cumpla alguna de los siguientes requisitos:

-No haya superado la asignatura mediante evaluación continua.

-Haya presentado mediante procedimiento administrativo un escrito dirigido al coordinador del máster solicitando la participación en dicha prueba en un plazo de diez días desde la publicación de la calificación mediante evaluación continua.

En esta prueba global se valorará la capacidad del estudiante para exponer los conocimientos adquiridos y aplicarlos a la resolución de problemas concretos.

En el caso de estudiantes que hayan sido evaluados según las dos modalidades previstas, prevalecerá la mejor calificación obtenida.

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

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

Las clases magistrales constituyen un importante método de transmisión del conocimiento y permiten comunicar rápidamente una gran cantidad de información. En esta asignatura, se emplearán clases expositivas-interactivas (conocidas como socráticas), que contemplan la participación de los estudiantes en el conocimiento impartido.

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: Las clases magistrales constituyen un importante método de transmisión del conocimiento y permiten comunicar rápidamente una gran cantidad de información. En esta asignatura, se emplearán clases expositivas-interactivas (conocidas como socráticas), que contemplan la participación de los estudiantes en el conocimiento impartido. El temario utilizado será el siguiente:

Bloque temático de Catálisis Homogénea

Conceptos básicos. Catálisis y química verde. Reacciones fundamentales en catálisis homogénea.

Aplicaciones de la catálisis homogénea: reacciones de isomerización, hidrogenación, hidrocianación e hidrosililación; reacciones carbonilación y oxidación; reacciones de polimerización, oligomerización y metátesis; reacciones de acoplamiento carbono-carbono.

Bloque temático de Catálisis Heterogénea 1

Catálisis heterogénea e inmovilización de catalizadores. Procesos catalíticos enantioselectivos industriales. Perspectivas de futuro.

Bloque temático de Catálisis Heterogénea 2

Etapas de procesos catalíticos. Cinética de reacciones catalíticas heterogéneas. Catalizadores sólidos industriales. Catalizadores heterogéneos en la síntesis de productos de alto valor añadido: síntesis, caracterización y aplicaciones.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Con carácter orientativo, se propone el siguiente calendario:

16 de diciembre: Prueba escrita de Catálisis Homogénea

11 de febrero: Prueba escrita de Catálisis Heterogénea 1

11 de febrero: Prueba escrita de Catálisis Heterogénea 2

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Barbaro, P.. Catalysis for Sustainable Energy Production
- Bhaduri, Sumit. Homogeneous catalysis : mechanisms and industrial applications / Sumit Bhaduri, Doble Mukesh . New York [etc.] : Wiley-Interscience, 2000
- Bowker, Michael. The basis and applications of heterogeneous catalysis / Michael Bowker . 1ª ed. Oxford : Oxford University Press, 1998
- Chorkendorff, I.. Concepts of modern catalysis and kinetics / I. Chorkendorff, J. W. Niemantsverdriet . 2nd rev. and enlarged ed. Weinheim : Wiley-VCH, cop. 2007
- Cole-Hamilton, D.J.. Catalyst Separation, Recovery and Recycling: Chemistry and Process Design.
- Parshall, George W.. Homogeneous catalysis : the applications and chemistry of catalysis by soluble transition metal complexes / George W. Parshall, Steven D. Ittel . 2nd ed. New York [etc] : John Wiley & Sons, cop. 1992
- Recoverable and recyclable catalysts / edited by Maurizio Benaglia . 1st ed. Hoboken, N.J. : Wiley, 2009
- Sheldon, Roger Arthur. Fine chemicals through heterogeneous catalysis / Roger Arthur Sheldon, Herman van Bekkum . 1st ed., 1st repr. Weinheim [etc.] : Wiley-VCH, 2002
- Thomas, J. M.. Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis / J. M. Thomas, W. J. Thomas . 1st ed., 3rd repr. Weinheim [etc.] : VCH, 2005