

Máster en Química Sostenible 66201 - Catálisis

Guía docente para el curso 2010 - 2011

Curso: 1, Semestre: 0, Créditos: 6.0

Información básica

Profesores

- Antonio Monzón Bescós amonzon@unizar.es
- Clara Isabel Herrerías Larripa clarah@unizar.es
- Silvia Irusta Alderete sirusta@unizar.es
- Luis Antonio Oro Giral oro@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

A modo indicativo, se muestran las fechas más relevantes del curso 2009-2010:

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...

Identifica las ventajas e inconvenientes del uso industrial de catalizadores.

1:

Selecciona catalizadores para llevar a cabo reacciones de interés industrial.

1:

Diseña catalizadores heterogéneos para llevar a cabo reacciones químicas.

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.

Contenido

Temario

Bloque temático de Catálisis Homogénea

Conceptos básicos. Catálisis y química verde. Reacciones fundamentales en catálisis homogénea. Aplicaciones de la catálisis homogénea: reacciones de isomerización, 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.

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...

- Explicar la importancia de la catálisis en la reducción de residuos y la mejora de la eficiencia de los procesos
- 1: Identificar los principales tipos de reacciones catalizadas
- 1: Evaluar la actividad y selectividad de los catalizadores
- 1: Reconocer las líneas de investigación actuales en Catálisis Homogénea
- Identificar los principios que controlan el mecanismo y la cinética de las reacciones catalíticas heterogéneas
- 1: Describir los métodos de obtención y caracterización de catalizadores heterogéneos
- 1: Identificar las principales aplicaciones industriales de los catalizadores heterogéneos

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: Prueba escrita 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%.

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: Ciclos de clases impartidas por un profesor invitado

Esta actividad consistirá en la impartición de un ciclo de 5 clases de 2 horas cada una para profundizar en la formación en la asignatura. Esta actividad tiene carácter complementario a la docencia prevista en la memoria de la titulación y su realización dependerá de la obtención de financiación del Programa de movilidad de profesores en másteres oficiales.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

A modo indicativo, se muestran las fechas más relevantes del curso 2009-2010:

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

Bibliografía

Bibliografía de referencia

Los libros recogidos a continuación están disponibles en la Biblioteca de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza. Puedes consultar su situación actual pinchando directamente sobre las referencias.

BENAGLIA, M. Recoverable and recyclable catalysts. Wiley, 2009.

BHADURI, S.; MUKESH, D. Homogeneous Catalysis. Wiley, 2000.

BOWKER, M. The Basis and Applications of Heterogeneous Catalysis. Oxford University Press, 1998.

CENTI, G.; VAN SANTEN, R. A. Catalysis for Renewables. Wiley-VCH, 2008.

CHORKENDORFF, I.; NIEMANTSVERDRIET, J. W. Concepts of Modern Catalysis and Kinetics. Wiley-VCH, 2003.

CORNILS, B. Aqueous-phase organometallic catalysis: Concepts and applications. 2nd edition. Wiley-VCH, 2004.

CORNILS, B. Catalysis from A to Z: A concise encyclopedia. Wiley-VCN, 2007.

CORNILS, B. Multiphase homogeneous catalysis. Wiley-VCH, 2005.

LEEUWEN, P. W. N. M. v. Homogeneous Catalysis: Understanding the Art. Kluwer, 2004.

ORO, L. A.; SOLA, E. (ed.). Fundamentos y aplicaciones de la Catálisis Homogénea. 2ª ed. Pub. Universidad de Zaragoza, 2000.

ROTHENBERG, G. Catalysis: concepts and green applications. Wiley-VCH, 2008.

SATTERFIELD, C. N. Heterogeneous Catalysis in Industrial Practice. 2nd edition. McGraw-Hill, 1996.

SHELDON, R. A. Fine Chemicals through Heterogeneous Catalysis. Wiley-VCH, 2001.

SHELDON, R. A.; ARENDS, I.; HANEFELD, U. Green chemistry and catalysis. Wiley-VCH, 2007.

THOMAS, J. M.; THOMAS, W. J. Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis. Wiley-VCH, 2005.

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. Charkendorff, 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