

PLAN DOCENTE DE ASIGNATURA

CÓDIGO NOMBRE

Asignatura	206047	QUÍMICA DE SUPERFICIES Y CATÁLISIS
Titulación	0206	LICENCIATURA EN QUÍMICA
Departamento	C128	CIENCIA DE LOS MATERIALES E INGENIERIA METALURGICA Y QUIMICA INORGANICA
Curso	-	
Duración (A: Anual, 1Q/2Q)	2Q	
Créditos ECTS	5,4	

Créditos Teóricos	3	Créditos Prácticos	3	Tipo	Optativa
-------------------	---	--------------------	---	------	----------

Profesores	Ginesa Blanco Montilla
Objetivos	<ul style="list-style-type: none"> • Presentar a los alumnos un conjunto de principios teóricos y hechos experimentales que les permitan adquirir una visión global de los aspectos fundamentales de la asignatura. • Dar a conocer los fundamentos básicos de la termodinámica y estructura de las superficies sólidas. Familiarizar al alumno con la descripción y manejo de las estructuras superficiales. • Dar a conocer los fundamentos teóricos y las técnicas experimentales utilizadas en los estudios de adsorción. Capacitar a los alumnos para obtener información química y textural de las superficies sólidas a partir de los experimentos de adsorción. • Introducir los conceptos fundamentales que permitan al alumno conocer y comprender la naturaleza de los fenómenos de catálisis heterogénea, los parámetros utilizados en su medida, las distintas etapas físico-químicas

Código Seguro de verificación:fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/7



fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==

	<p>implicadas, y los modelos teóricos aplicados en su descripción.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Justificar la relevancia económica y tecnológica de los fenómenos catalíticos heterogéneos. Ilustrar mediante una diversidad de ejemplos, su aplicación en procesos de alto interés industrial. • Dar a conocer los componentes fundamentales de los catalizadores, la función de cada uno de ellos, y los métodos utilizadas en su preparación • Ilustrar mediante la discusión de ejemplos concretos la utilidad y limitaciones de la amplia diversidad de técnicas empleadas actualmente en la caracterización de materiales catalíticos • Promover en el alumno sus capacidades analíticas y de síntesis. Fomentar su participación en discusiones sobre diversos temas que se susciten en el desarrollo de la asignatura. Además de su interés científico intrínseco, estas discusiones tienen como objetivo mejorar la expresión oral de los alumnos. • Estimular el uso por los alumnos, de forma individual o en grupo, de programas informáticos y técnicas audiovisuales, que son habitualmente utilizados en la presentación y discusión de trabajos científicos, bien sea de forma oral o escrita.
Programa	<p>1.- Introducción al estudio de la superficies sólidas. Principales tipos de estructuras sólidas. Estructura superficial de los Metales. Termodinámica de las superficies: efectos de relajación y reconstrucción. Partículas metálicas. Superficies de alto índice de Miller. Superficies de cristales simples de compuestos inorgánicos.</p> <p>2.- Adsorción: Conceptos de fisisorción y quimisorción. Aspectos cinéticos de la adsorción. Aspectos termodinámicos de la adsorción: curvas de Lenard-Jones. Procesos de desorción.</p> <p>3.- Modelos teóricos de uso frecuente en la interpretación de los fenómenos de adsorción: aplicabilidad y limitaciones. Adsorción en monocapa: Modelos de Langmuir, Henry, Freundlich y Temkin. Adsorción en multicapa: Modelo de Brunauer, Emmet y Teller.</p>

Código Seguro de verificación:fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/7



fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==

4.- Técnicas experimentales en el estudio de los procesos de adsorción. Técnicas que estudian especies adsorbidas: técnicas de difracción, espectroscópicas, isothermas de adsorción, técnicas calorimétricas. Técnicas que estudian la desorción de especies: Desorción térmica programada (DTP).

5.- Aplicación de las técnicas de fisiorción al estudio textural de sólidos. Determinación de la superficie específica de sólidos porosos. Clasificación BDDT de las isothermas de adsorción. Tipos de porosidad. Método t de "de Boer". Distribución de tamaño de poros: Método de Pierce. Otras técnicas para el estudio textural de sólidos.

6.- Introducción a la catálisis heterogénea. Ventajas de la utilización de catalizadores. Tipos de procesos catalíticos. Conceptos de interés en catálisis heterogénea.

7.- Cinética de los procesos catalíticos heterogéneos. Etapas fundamentales de un proceso catalítico heterogéneo. Desarrollo e expresiones cinéticas: control por difusión, control por adsorción, control por reacción en superficie. Mecanismos de Langmuir-Hinshelwood y Eley-Rideal.

8.- Constitución de los catalizadores heterogéneos. Conceptos de fase activa, soporte y promotor. Clasificación y formas de presentación de los catalizadores heterogéneos.

9.- Métodos de preparación de catalizadores heterogéneos. Preparación de catalizadores masivos o soportes: precipitación, métodos hidrotermales, operaciones de conformado. Preparación de catalizadores soportados: impregnación, adsorción/intercambio iónico, precipitación.

10.- Caracterización de catalizadores. Concepto de dispersión metálica: determinación experimental de la dispersión. Desactivación de catalizadores.

11.- Aplicaciones industriales de la catálisis heterogénea. Procesos catalíticos en la fabricación de combustibles y sustancias orgánicas.

Código Seguro de verificación:fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/7



fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==

	Fabricación de productos inorgánicos: NH ₃ , HNO ₃ , H ₂ SO ₄ . Procesos catalíticos destinados al control de problemas medioambientales.
Metodología	<ul style="list-style-type: none"> • Clases expositivas. En ellas, el profesor presentará de forma ordenada los conceptos teóricos y hechos experimentales que permitan al alumno obtener una visión global y comprensiva de la asignatura. Como apoyo, se proporcionará a los alumnos copia del material docente utilizado por el profesor, fundamentalmente transparencias. Este material estará disponible en la plataforma webCT de la asignatura. • Seminarios dedicados a la resolución por los alumnos de ejercicios numéricos y cuestiones que el profesor habrá anunciado con suficiente antelación. Los ejercicios elegidos formarán parte de la colección a la que tendrán acceso los alumnos, a través de internet. • Seminarios dedicados a la presentación por los alumnos, y posterior discusión, de artículos científicos, escritos en inglés o español. Estos artículos, seleccionados por el profesor, estarán disponibles en la página web de la asignatura. • Realización por los alumnos de experimentos simulados de adsorción volumétrica, mediante el empleo del programa UCADSOR, desarrollado en nuestro Departamento. Esta actividad se llevará a cabo en las aulas de informática de la Facultad, en sesiones tutorizadas por los profesores de la asignatura • Elaboración por los alumnos de informes científicos escritos en los que resuman actividades desarrolladas a lo largo del curso. Entre ellas cabría citar: a) Asistencia a conferencias impartidas en la Facultad sobre temas directamente relacionados con la asignatura. b) Los experimentos simulados de fisisorción y quimisorción, mencionados en el punto anterior. • Ejercicios de auto-evaluación a través de internet, mediante el empleo de la plataforma webCT
Criterios y sistemas de evaluación	<p>La evaluación atenderá a los siguientes criterios:</p> <p>1) Examen Final de la Asignatura: Consistirá en un único examen escrito que constará de dos partes, una relativa a Química de Superficies, y la otra a</p>

Código Seguro de verificación:fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/7



fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==

Catálisis Heterogénea. El examen podrá incluir: a) Cuestiones cortas consistentes en la formulación de definiciones breves y precisas de conceptos que se juzguen relevantes. b) Resolución de un cuestionario (10 cuestiones), tipo WEB-CT, similar a los que se generan en los ejercicios de auto-evaluación que los alumnos tendrán a su disposición a través de internet. c) Resolución de un ejercicio de características similares a los que se discutirán en las clases prácticas. d) Desarrollo de un tema, en cuya exposición, además de los contenidos concretos, se valorará la capacidad para integrar bajo una perspectiva común distintos aspectos del temario.

Este examen será obligatorio para todos los alumnos matriculados. Sobre un máximo de 10 puntos, se considerarán aprobados aquellos exámenes que alcancen un mínimo de 5,0. La nota final se obtendrá promediando con igual peso las calificaciones correspondientes a las dos partes de la asignatura (Química de Superficies y Catálisis Heterogénea). Si en alguna de ellas no se alcanzaran los 5,0 puntos, solo se considerarán aprobados aquellos exámenes en los que la puntuación mínima de cualesquiera de las dos partes sea de 3,5, y la nota final promedio resulte igual o superior a 5,0.

2) Al concluir cada una de las dos partes en las que se divide la asignatura, los alumnos que lo deseen podrán realizar un ejercicio de auto-evaluación, tipo WEB-CT, consistente en 10 cuestiones con 4 opciones de respuesta, de las que solo una es correcta. La calificación máxima que podrá obtenerse en cada uno de los dos ejercicios será de 0,75 puntos (0,15 puntos por cada respuesta correcta que exceda de 5). La puntuación obtenida en los ejercicios de auto-evaluación (2x0,75=1,5, como máximo), podrá sumarse a la calificación del examen final, si ésta última es mayor o igual a 3,5. Si cumplidos los requisitos citados, la suma de las calificaciones correspondientes al examen final y a los dos ejercicios de auto-evaluación fuera igual o superior a 5,0, el alumno resultará aprobado.

3) La participación activa del alumno en la presentación y discusión de artículos, ejercicios, o cualquier otra actividad programada durante el curso, también será tenida en cuenta, corrigiendo

Código Seguro de verificación:fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.


FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	5/7



fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==

	<p>eventualmente al alza la nota a la que se hace referencia en el apartado 2. Si la participación regular del alumno en las actividades llevadas a cabo durante el curso, y la evaluación de las mismas, así lo aconsejan, alumnos calificados con más de 4,0 puntos en el apartado 2, es decir, que además del examen final hubieran realizado los dos ejercicios de auto-evaluación, podrían resultar aprobados. Igualmente podría elevarse la calificación de aprobado a notable, o de notable a sobresaliente, atendiendo al número y calidad de las actividades, contempladas en este apartado 3, en las que un determinado alumno pudiera haber participado.</p>
Recursos bibliográficos	<p>BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL</p> <ul style="list-style-type: none"> • SURFACES. G. Attard, C. Barnes. Oxford University Press (1998) • INTRODUCTION TO SURFACE CHEMISTRY AND CATALYSIS. G.A. Somorjai. John Wiley & Sons (1994) • ADSORPTION BY POWDERS AND POROUS SOLIDS. J. Rouquerol, F. Rouquerol, K. Sing. Academic Press. (1999) • FUNDAMENTALS OF INDUSTRIAL CATALYTIC PROCESSES. R.J. Farrauto, C.H. Bartholomew. Chapman & May (1997) • HETEROGENEOUS CATALYSIS. Principles and Applications. G.C. Bond. Oxford University Press (1987) • HETEROGENOUS CATALYSIS IN INDUSTRIAL PRACTICE. C.N. Satterfield. McGraw-Hill (1991) • CATALYSIS. An Integrated Approach to Homogeneous, Heterogeneous and Industrial Catalysis. Editores: J.A. Moulijn, P.W.N.M. van Leuwen, R.A. van Santen. Elsevier (1993) • CATALYTIC AIR POLLUTION CONTROL: Commercial Technology (2ª ed). R.M. Heck, R.J. Farrauto. Wiley (2002) • CONCEPTS OF MODERN CATALYSIS AND KINETICS. I. Chorkendorff, J.W. Niemantsverdriet, Wiley-VCH (2003) <p>BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA</p> <ul style="list-style-type: none"> • THE BASIS AND APPLICATIONS OF HETEROGENEOUS CATALYSIS. M. Bowker. Oxford University Press (1998) • PRINCIPLES OF CATALYSIS. G.C. Bond. The Chemical Society (1972) • HETEROGENEOUS CATALYSIS FOR THE SYNTHETIC CHEMIST. R.L. Augustine. Marcel Dekker, Inc. (1996) • MATERIAL CONCEPTS IN SURFACE REACTIVITY

Código Seguro de verificación:fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	6/7
			
fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==			

AND CATALYSIS. H. Wise, J. Oudar. Academic Press Inc. (1990)

- GREEN CHEMISTRY: DESIGNING CHEMISTRY FOR THE ENVIRONMENT. Editors: Paul T. Anastas, Tracy C. Williamson. American Chemical Society, Washington (1996). (ACS symposium series / American Chemical Society ; 626) ISBN: 0841233993
- AUTOMOBILES AND POLLUTION. P. Degobert. Society of Automotive Engineers, Inc. (1995)
- HANDBOOK OF CHEMICAL TECHNOLOGY AND POLLUTION CONTROL. M.B. Hocking. Academic Press Inc. (1998)
- LES TECHNIQUES PHYSIQUES D'ÉTUDE DES CATALYSEURS. B. Imelik, J.C. Védrine. Editions Technip (1988)
- <http://www.aue.auc.dk/~stoltze/catal/book/>
- AN INTRODUCTION TO SURFACE ANALYSIS BY XPS AND AES. J.F. Watts, J. Wolstenholme. John Wiley & Sons (2003)
- SURFACE ANALYSIS. The Principal Techniques. Editor: J.C. Vickerman. John Wiley & Sons (1997)

Nota: Además de las obras mencionadas, durante el desarrollo del curso podrá hacerse referencia a otros textos, monografías, artículos, o páginas web, cuya lectura/visita se considere recomendable.

Código Seguro de verificación:fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
 Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	7/7



fcYi7PNBbhtVs3xWGD0Ksg==