

TEMARIO TEORICO: QUÍMICA DE SUPERFICIES Y CATÁLISIS

1.- Introducción al estudio de las superficies sólidas. Termodinámica de la creación de una superficie sólida. Caras preferentes de un cristal. Efectos de relajación. Descripción estructural de las superficies sólidas. Naturaleza dinámica de las superficies sólidas: Fenómenos de Reconstrucción Superficial.

2.- Adsorción: Conceptos de Fisorción y Quimisorción. Aspectos Termodinámicos y Cinéticos de la Adsorción. Modelos Teóricos de uso frecuente en la interpretación de los fenómenos de Adsorción: Aplicabilidad y Limitaciones. Técnicas Experimentales en el estudio de los procesos de Adsorción.

3.- Aplicación de las Técnicas de Fisorción al estudio Textural de Sólidos. Determinación de la Superficie Específica de Sólidos Porosos. Clasificación de la Isotermas de Adsorción. Tipos de Porosidad. Métodos β y α . Distribución de Tamaño de Poros. Otras técnicas para el estudio textural de sólidos

4.- Quimisorción: su aplicación en la Caracterización Química de las Superficies Sólidas. Estudio particular de algunos procesos de Adsorción Química sobre Metales y Oxidos Metálicos. Técnicas para el estudio experimental de los Fenómenos de Quimisorción.

5.- Catálisis Heterogénea. Etapas Fundamentales de los Procesos Catalíticos en Fase Heterogénea. Estudio Cinético de las Reacciones Catalíticas Heterogéneas.

6.- Catalizadores Heterogéneos. Criterios de Diseño de los Catalizadores Heterogéneos. Constituyentes Fundamentales de un Catalizador Heterogéneo: Conceptos de Fase Activa, Promotor y Soporte. Métodos Generales de Preparación de los Catalizadores.

7.- Catalizadores Metálicos Soportados. Técnicas de Deposición de la Fase Metálica. Métodos usuales de Activación. Caracterización Química y Nanoestructural de Catalizadores Metálicos Soportados: Concepto de Dispersión Metálica. Determinación Experimental de la Dispersión Metálica.

8.- Desactivación de Catalizadores. Mecanismos que originan la Desactivación de los Catalizadores Heterogéneos. Métodos de Regeneración de Catalizadores.

9.- Presencia de la Catálisis Heterogénea en la Industria Química. Procesos Catalíticos en la Industria Petróleoquímica. "Upgrading" de Hidrocarburos saturados Ligeros (Gas Natural). Reacciones de Oxidación Total de Hidrocarburos. Oxidación Selectiva de Hidrocarburos. La Catálisis Heterogénea en "Química Fina". Procesos Catalíticos Heterogéneos en Síntesis a gran escala de Productos Inorgánicos.

10.- Catálisis Heterogénea y Medio Ambiente. Catalizadores para el control de las emisiones de NO_x generadas en Procesos de Oxidación (DeNO_x). Eliminación Catalítica de SO_x . Catalizadores para la eliminación de VOC's ("Volatile Organic Compounds"). Catalizadores tipo TWC ("Three Way Catalysts") para escape de automóviles. Otros ejemplos de Catálisis Medioambiental.

Código Seguro de verificación: Za5pceVZdUCQiPoQo8BnGA==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/4



Za5pceVZdUCQiPoQo8BnGA==

**TEMARIO PRÁCTICO: QUÍMICA DE SUPERFICIES Y CATÁLISIS**

Los créditos prácticos se desarrollarán, en general, siguiendo un esquema de organización de tipo PEP, es decir, con participación de grupos reducidos de alumnos, cuyo tamaño dependerá de la actividad concreta que se realice. Entre las actividades previstas cabe mencionar las siguientes:

- Discusión de algún artículo científico en el que se aborden temas estrechamente relacionados con el programa de la asignatura. Los alumnos tendrán acceso a través de internet a una copia de la(s) publicación(es) seleccionada(s). La presentación y discusión de la(s) misma(s) se realizará por parte de los propios alumnos.
- Asistencia a conferencias que se celebren en la Facultad sobre temas afines a la asignatura. Los alumnos deberán entregar un breve informe en el que se resuman los aspectos más destacados de la conferencia.
- Sesiones de seminario dedicados a la resolución y discusión de ejercicios que contribuyan a una mejor comprensión del temario. Los alumnos, a través de internet, podrán acceder a los ejercicios objeto de seminario con la debida antelación. La presentación, resolución, y discusión de estos ejercicios se llevará a cabo por parte de los alumnos.
- Con ayuda de las aulas de informática, algunas de las sesiones prácticas tendrán como objetivo promover entre los alumnos la realización de ejercicios de auto-evaluación. Se utilizará el programa WEB-CT. Esta facilidad estará permanentemente a disposición de los alumnos, a través de internet. El cuestionario al que tendrían acceso se ampliará progresivamente, adaptándose al desarrollo de la asignatura.
- Con ayuda de las aulas de informática, algunas de las sesiones prácticas se dedicarán al uso del programa UCADSOR, desarrollado por los profesores del Departamento. Este programa permite simular experimentos de fisi- y quimi-sorción, como resultado de los cuales se obtienen las correspondientes isotermas. Las sesiones de registro de las isotermas se completan con otras dedicadas a su análisis e interpretación (Adsorción física: Determinación de los Parámetros Característicos de la Fisisorción, de la Superficie BET, de las Curvas de Distribución de Tamaño de Poros, etc. Quimisorción: Determinación de dispersiones metálicas a partir de datos de adsorción de H₂).
- La aplicación del programa UCADSOR se completará con el paso de los alumnos por el laboratorio. El objetivo de la visita es: conocer un dispositivo real para estudios de adsorción, identificar sus componentes fundamentales, y reproducir la secuencia de manipulaciones que conduciría al registro de una isoterma experimental.
- Visita a una empresa en la que se desarrollen procesos catalíticos a escala industrial. Aunque podrían visitarse otras, en nuestro entorno geográfico son especialmente importantes las empresas de refinación y transformación del petróleo. Concluida la visita, los alumnos elaborarán un breve informe en el que se resuman los aspectos más destacados de la misma

Código Seguro de verificación:Za5pceVZdUCQiPoQo8BnGA==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/4



Za5pceVZdUCQiPoQo8BnGA==



CRITERIOS DE EVALUACION: QUÍMICA DE SUPERFICIES Y CATÁLISIS

La evaluación atenderá a los siguientes criterios:

- 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 Catálisis Heterogénea. El examen podrá incluir:
 - a) Cuestiones cortas consistentes en la formulación de definiciones breves y precisas de conceptos que se juzgan 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 ($2 \times 0,75 = 1,5$, 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. En su reunión final de evaluación, los profesores decidirán la calificación definitiva, corrigiendo 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, en la reunión final de evaluación 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.

Código Seguro de verificación: Za5pceVZdUCQiPoQo8BnGA==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/4



Za5pceVZdUCQiPoQo8BnGA==


BLIBLIOGRAFIA: QUÍMICA DE SUPERFICIES Y CATÁLISIS

- SURFACES. G. Attard, C. Barnes. Oxford University Press (1998)
- INTRODUCTION TO SURFACE CHEMISTRY AND CATALYSIS. G.A. Somorjai. John Wiley & Sons (1994)
- ADSORPTION, SURFACE AREA AND POROSITY. S.J. Gregg, K.S.W. Sing. Academic Press (1982)
- 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)
- HETEROGENEOUS 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)
- 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 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/>

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

Código Seguro de verificación:Za5pceVZdUCQiPoQo8BnGA==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/4



Za5pceVZdUCQiPoQo8BnGA==