

IQ755 CATALISIS APLICADA

10 UNIDADES DOCENTES

REQUISITOS: IQ55AS/IQ55CS/AUTOR

PROFESORES: Paulo Araya
Raul Quijada

OBJETIVOS: Entregar los fundamentos teóricos y experimentales de la catálisis, en especial aquellos que comprende la catálisis heterogénea. Se dará énfasis a las aplicaciones más relevantes en la industria química moderna y en los procesos de abatimiento de contaminantes gaseosos.

PROGRAMA:

1.- SUPERFICIES. DEFINICIONES PRELIMINARES. METODOS DE CARACTERIZACION.

Introducción: Superficie externa y superficie interna en sólidos. Modelo BET para determinar el área de un sólido. Porosidad y Distribución de tamaños de poros. Sorptometría de gases y porosimetría de intrusión de Hg.

2.- DINAMICA EN SUPERFICIES.

Cinética de la adsorción de gases en sólidos. Velocidad de adsorción y desorción de moléculas gaseosas. Coeficiente de sticking: determinación experimental y modelos teóricos. Modelos de transferencia de energía y adsorción. Mecanismos de difusión de adsorbatos en la superficie. La isoterma de adsorción desde el punto de vista cinético. Adsorción química.

3.- CATALISIS POR SUPERFICIES. CATALIZADORES SOLIDOS.

Catalizadores sólidos soportados y no soportados. Preparación de catalizadores básicos y soportados. Discusión de las principales técnicas para caracterizar la superficie catalítica: Microscopía electrónica, XPS, XRD, STEM, etc. Actividad, Selectividad y Estabilidad de catalizadores sólidos. Mecanismos de reacción y expresiones cinéticas para diferentes etapas controlantes. Mecanismos Langmuir-Hinshelwood, Eley-Rideal, y Mars-Van Krevelen.

4.- ACTIVIDAD CATALITICA DE METALES Y NO METALES.

Factores geométricos y electrónicos. Estructura electrónica en metales. Relación entre estructura y actividad catalítica. Semiconductores.

5.- CATALISIS HOMOGENEA.

Tratamientos cinéticos generales de reacciones catalíticas homogéneas. Reacciones catalíticas ácido base. Reacciones catalíticas por sales metálicas y compuestos de coordinación. Ejemplos: oxidación de hidrocarburos en fase líquida, etc.

6.- CATALISIS EN PROCESOS DE OLIGOMERIZACION Y POLIMERIZACION.

Introducción. Clasificación: catalizadores de 1^a, 2^a, 3^a y 4^a generación. Catalizadores del tipo metallocenos. Catalizadores en base a Titanio, Cromo, Vanadio, Niquel y Zirconio. Principales grupos ligandos y su función. Cocatalizadores: sus estructuras y funciones. Alquilación del catalizador por grupos provenientes del cocatalizador. Formación del sistema catalítico. Principales reacciones y mecanismos propuestos, monometálicos y bimetálicos. Estereoregularidad del catalizador formado. Control y reactividad. Reactividad de los monómeros vinílicos cíclicos y polares. Productos finales formados en la polimerización. Estructura, peso molecular, distribución y morfología.

7.- MECANISMOS, CINETICA Y MODELOS DE POLIMERIZACION.

Principales mecanismos: catálisis homogénea y heterogénea. Mecanismo monometálico y bimetálico. Cinética de polimerización. Ecuación de velocidad de polimerización para las diferentes etapas. Curva de velocidad para catalizadores Ziegler - Natta. Análisis de cada etapa: inducción, crecimiento, velocidad máxima, caída y velocidad constante. Principales modelos propuestos para la polimerización catalítica. Aplicación de los modelos Rideal, Langmuir-Hinshelwood, Keii, Tkit, etc.. Esquemas cinéticos. Análisis de los esquemas propuestos para las diferentes etapas del proceso de polimerización.

8.- EJEMPLOS DE REACCIONES INDUSTRIALES.

Análisis de los principales procesos catalíticos de aplicación industrial. Nuevas tecnologías para abatimientos de contaminantes en efluentes gaseosos. Desafíos futuros.

REFERENCIAS:

- J. M. Thomas y W.J. Thomas. Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis. VCH Weinheim, Germany (1997).
- J. R. Anderson. Structure of Metallic Catalysts. Academic Press (1975).
- J.J. Carberry. Chemical and Catalytic Reaction Engineering. Mc Graw-Hill (1976).
- B.C. Gates, J. R. Katzer y G.C. Schuit. Chemistry of Catalytic Processes. Mc Graw-Hill (1979).
- G. A. Somorjai. Introduction to Surface Chemistry and Catalysis. J. Wiley and Sons (1994).
- J. Boor. Ziegler-Natta Catalysts and Polymerization. Academic Press Inc. New York (1979).
- G. Wilkinson, F. G. A. Stone y E. W. Abel. Comprehensive Organometallic Chemistry. Pergamon Press, Oxford (1982).
- G. H. Olivé and S. Olivé. Coordination and Catalysis. Verlag Chemie: Weinheim (1976).
- C. Satterfield. Heterogeneous Catalysis in Industrial Practice. 2^a edition. Mc Graw-Hill (1991).
- R. M. Heck y R. Farrauto. Catalytic Air Pollution Control. Van Nostrand Reinhold, New York (1995).