

**Catàlisi****2015/2016**

Codi: 102512

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OT	4	0

**Professor de contacte**

Nom: Joan Carles Bayón Rueda

Correu electrònic: JoanCarles.Bayon@uab.cat

**Utilització de llengües**

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

**Altres indicacions sobre les llengües**

El llibre de text està escrit en anglès i s'utilitzarà algun altre material escrit en anglès

**Equip docent**

Gregori Ujaque Pérez

**Prerequisits**

La catàlisi és una disciplina molt transversal que, en major o menor extensió, fa ús dels coneixements de moltes branques de la química. Per tant, encara que no existeixen formalment prerequisits, és molt recomanable que els alumnes, en el moment d'iniciar aquesta assignatura, hagin cursat totes, o la major part les següents assignatures de 3er curs: Química Física, Química dels Compostos de Coordinació i Organometàl·lica, Mètodes Sintètics, Determinació Estructural, Ciència de Materials i Bioquímica. Aquests coneixements previs permetran integrar i tractar molts aspectes de la química, que han estat presentats en assignatures prèviament cursades per l'alumne, d'una forma més global, afavorint d'aquesta forma, i de manera significativa, la maduresa científica de l'alumne. Probablement aquest és un dels aspectes més formatius de l'assignatura, conjuntament amb el desenvolupament dels conceptes i aplicacions fonamentals de la catàlisi. No obstant lo anterior, és possible cursar l'assignatura tot i no haver superat alguna de les assignatures de 3er curs abans esmentades.

**Objectius**

L'objectiu de l'assignatura és proporcionar a l'alumne una visió de conjunt de la catàlisi com disciplina transversal de la química, tant els aspectes més fonamentals, com en els més aplicats, amb especial èmfasi en l'ús a la indústria dels processos catalítics, com a eina crucial en el desenvolupament d'una *química verda*.

**Competències**

- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.
- Avaluar els riscos sanitaris i l'impacte ambiental i socioeconòmic associat a les substàncies químiques i a la indústria química.

- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Desenvolupar treballs de síntesi i anàlisi de tipus químic a partir de procediments establerts prèviament.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Manejar instruments i material estàndard en laboratoris químics d'anàlisi i síntesi.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

## Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Analitzar els aspectes mediambientals i socioeconòmics d'un procés catalític.
3. Analitzar la influència de les interaccions catalitzador-substrat en la velocitat de reacció dels processos catalítics heterogenis amb els models cinètics adequats.
4. Analitzar la influència dels efectes estèrics i electrònics dels lligands en les propietats d'un complex metàl·lic que actua com a catalitzador.
5. Aplicar els conceptes de la reactivitat dels compostos a la interpretació dels processos catalítics.
6. Aprendre de manera autònoma.
7. Comparar els processos catalítics des del punt de vista del seu cost econòmic i mediambiental.
8. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
9. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
10. Demostrar motivació per la qualitat.
11. Descriure alguns dels processos catalítics més importants en fase homogènia, heterogènia i en biocatàlisi, i analitzar-ne les aplicacions i limitacions.
12. Descriure els aspectes fonamentals d'un procés catalític i d'un catalitzador.
13. Descriure la cinètica química dels processos catalítics en fase homogènia i heterogènia, i proposar mecanismes de reacció possibles per a processos catalítics a partir de dades i coneixements cinètics i estructurals.
14. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
15. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
16. Interpretar i racionalitzar els mecanismes establerts per als processos anteriors i relacionar-los amb la naturalesa dels catalitzadors utilitzats en la seva activitat i selectivitat.
17. Interpretar i racionalitzar les dades bibliogràfiques sobre un procés catalític no descrit en les classes teòriques.
18. Manejar la instrumentació i el material necessaris per avaluar una reacció catalítica.
19. Manipular adequadament els productes químics necessaris per dur a terme reaccions catalítiques.
20. Manipular catalitzadors i realitzar reaccions catalítiques.
21. Manipular gasos i, en particular, manipular amb seguretat gasos inflamables.
22. Mantenir un compromís ètic.
23. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
24. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
25. Proposar idees i solucions creatives.
26. Proposar solucions per millorar l'activitat i/o selectivitat d'un catalitzador determinat, a partir de l'anàlisi de dades experimentals.

27. Raonar de forma crítica.
28. Reconèixer els termes industrials en llengua anglesa més freqüents en l'àmbit de la catàlisi.
29. Reconèixer les diferències entre els catalitzadors homogenis i heterogenis, descriure'n els avantatges i inconvenients, així com els àmbits d'aplicació més adequats a aquests processos.
30. Resoldre problemes i prendre decisions.
31. Resoldre problemes relatius a processos catalítics.
32. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
33. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

## Continguts

### TEORIA I PROBLEMES

#### UNITAT 1. INTRODUCCIÓ

**Aspectes generals.** Catàlisi i desenvolupament sostenible. Economia d'àtoms i factor E. Tipus d'acció d'un catalitzador. Classificació dels processos catalítics

**Característiques d'un catalitzador.** Activitat, selectivitat, estabilitat i eficiència d'un catalitzador (TON, TOF). Desactivació, degradació tèrmica i enverinament d'un catalitzador. Inhibidors d'una reacció catalítica.

**Exemples industrials.** Òxid d'etilè. Metil *tert*-butil èter (MTBE). Polipropilè isotàctic. Procés SMPO d'obtenció d'òxid de propilè i estirè. Síntesi de metanol. Procés BHC d'obtenció d'ibuprofè.

#### UNITAT 2. CINÈTICA DE LES REACCIONS CATALÍTIQUES

**Cinètica de processos catalítics homogenis.** Velocitat de reacció. Constant de velocitat. Orde de reacció. Molecularitat. Etapa elemental. Mecanisme de reacció. Determinació de l'orde i constant de velocitat: mètode d'integració, període de semirreacció, diferencial i aïllament. Reaccions complexes. Aproximació de l'etapa determinant de la velocitat i aproximació de l'estat d'equilibri. Dependència de la velocitat amb la temperatura. Perfil de reacció.

**Cinètica de processos catalítics heterogenis.** Velocitat de reacció. Constant de velocitat. Fisiadsorció i quimiadsorció. Mecanisme de reacció: difusió, adsorció, reacció química i desorció. Isotermes d'adsorció de Langmuir. Cinètiques de Langmuir-Hinshelwood i de Rideal-Eley. Dependència de la velocitat amb la temperatura. Perfil de reacció. Variació de la velocitat de reacció amb distintes mesures de la interacció catalitzador/substrat: Principi de Sabatier i representacions tipus volcà.

#### UNITAT 3. CATÀLISI HOMOGÈNIA

**Aspectes generals.** Etapes elementals en catàlisi homogènia. Relacions estructura/reactivitat en catàlisi homogènia. Efectes estèrics i electrònics dels lligants.

**Exemples de procés catalítics homogenis.** Importànciaindustrial de la catàlisi homogènia. Hidrogenació de substrats insaturats (C=C, C=O, C=N, Metolachlor). Carbonilació del metanol: del rodi (Monsanto) a l'iridi (Cativa). Hidroformilació d'olefines. Oxidació catalítica. Hidrocianació de butadiè. Procés SHOP. Recuperació i reciclatge del catalitzador.

#### UNITAT 4. CATÀLISI HETEROGÈNIA

**Aspectes generals.** Importància industrial: exemples dels processos més importants. Tipus de catalitzadors heterogenis.

**Sistemes catalítics gas/sòlid.** Lloc catalític actiu. Catalitzadors model. Catalitzadors reals: preparació, tipus de suports i tècniques de caracterització. Descripció d'alguns processos que empren catalitzadors heterogenis: hidrogenació d'alquens; el convertidor catalític dels cotxes; craqueig i reformat d'hidrocarburs; síntesi del *p*-xilè.

**Sistemes catalítics líquid/líquid i líquid gas.** Catàlisi bifàsica: aquosa; dissolvents fluorats; líquids iònics; transferència de fase.

**Nous processos en catàlisi heterogènia.** Processos "verds". Electrocatàlisis

#### UNITAT 5. BIOCATÀLISIS

**Aspectes generals.** Biocatàlisis *versus* catàlisi química. Fermentació. Transformacions amb microorganismes. Transformacions amb enzims aïllats. Mecanismes en catàlisi

enzimàtica (catàlisi àcida/bàsica, catàlisi nucleòfila). Tipus de catalitzadors enzimàtics (hidrolases, lipases, isomerases, transferases, oxidoreductases). Enzims immobilitzats. **Exemples de processos biocatalítics.** Obtenció d'àcid 6-aminopenicilànic (6-APA). Isomerització de glucosa a fructosa (HFCS). Hidròlisi d'acrilonitril a acrilamida. Obtenció de paclitaxel per fermentació. Processos mixtos (rutes quimioenzimàtiques): àcid glicòlic (Du Pont), polifenilè(ICI) i Aspartame (DSM).

## PRÀCTIQUES DE LABORATORI

Al llarg del curs es realitzarn 4 sessions de pràctiques de laboratori, cadascuna d'elles centrada en un dels quatre darrers apartats del programa.

### Metodologia

L'assignatura s'estructura, des del punt de vista presencial, en classes magistrals, seminaris de problemes i pràctiques de laboratori (aproximadament un 30% del temps total que l'alumna dedica a l'assignatura). A banda d'aquesta activitat presencial, l'alumne haurà de dedicar el restant 70% del temps disponible per l'assignatura a l'estudi i comprensió de matèria impartida a les classes magistrals, la resolució de problemes, la preparació de les pràctiques i les activitats d'avaluació continuada (resolució de problemes, preparació de pòsters, resumir articles, etc), a banda dels exàmens.

Com a assignatura presencial, és obligatòria l'assistència a las classes de teoria, problemes o a les sessions de laboratori. Conseqüentment, es podran realitzar proves de seguiment durant qualsevol d'aquestes classes sense necessitat d'avisar prèviament a als alumnes.

### Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Classes magistrals	31	1,24	2, 3, 4, 5, 7, 11, 12, 13, 16, 29
Discusió de problemes en seminaris	9	0,36	9, 10, 17, 23, 25, 26, 27, 30, 31
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Realització de pràctiques de laboratori	18	0,72	1, 6, 8, 9, 10, 14, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 30, 32, 33
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Preparació i estudi amb el llibre de text de la matèria impartida a les classes magistrals	42	1,68	2, 4, 5, 6, 7, 11, 12, 13, 16, 27, 28, 29
Resolució de problemes	18	0,72	14, 17, 24, 26, 28, 30, 31

### Avaluació

La nota final estarà constituïda per una nota d'examen (60% del total de la nota) i una nota d'avaluació continuada (40% del total de la nota). La mitjana ponderada d'ambdues notes haurà de ser igual o superior a 5 per superar l'assignatura i, a més, s'han de complir els següents requeriments.

**Exàmens** (60% de la nota final): Al llarg dels curs es realitzaran dos exàmens parcials. Per superar l'assignatura només amb els exàmens parcials caldrà que la nota de cada examen sigui igual o superior 4 i que la mitjana sigui major o igual que 4,5. Si l'alumne no supera l'assignatura per parcials podrà realitzar un

examen final en el que igualment haurà d'obtenir una nota igual o superior a 4,5 per fer la mitjana amb la nota d'avaluació continuada. Per superar l'assignatura aquesta mitjana ponderada (60% examen final, 40% avaluació continuada) haurà de ser major o igual que 5. A l'examen final de recuperació també poden presentar els alumnes que, havent superat l'assignatura per curs, volen millorar la seva nota. El tractament de la nota final per aquests alumnes serà el mateix que pels alumnes que no han superat l'assignatura.

**Avaluació continuada** (40% de la nota final): Depenent del nombre d'alumnes i de la disponibilitat de temps, al llarg del curs es realitzaran diferents avaluacions, tal com correcció de problemes, realització d'un pòster, comentari articles i presentació de resultats de les pràctiques de laboratori.

La nota d'avaluació continuada, estarà constituïda per tres parts amb el mateix pes relatiu. Les dues primeres correspondran a la mitjana de les proves realitzades abans i després del primer parcial; la tercera correspondrà la nota de laboratori. En el conjunt d'aquestes avaluacions l'alumne haurà d'obtenir una nota mitjana global igual o superior a 4,5 per superar l'assignatura. La nota de l'avaluació continuada no és recuperable.

### Laboratori

L'assistència a les sessions de laboratori és indispensable per a superar el curs.

Els alumnes que han cursat una vegada l'assignatura i no l'han superada, podran mantenir, si ho desitgen, la seva nota de pràctiques del curs anterior, sense repetir les pràctiques, si aquesta nota és superior o igual a 5.

L'alumne que no segueixi les normes de seguretat al laboratori podrà ser expulsat del mateix, la qual cosa comporta suspendre l'assignatura amb una qualificació de O.

### Qualificacions finals

Els alumnes que realitzin, com a mínim, un examen parcial una qualificació tindran una qualificació de "Suspès", "Aprovat", "Notable", "Excel·lent" o "Matrícula d'honor". Si l'alumne no realitza cap examen parcial i no assisteix al laboratori de pràctiques serà qualificat com "No avaluable"

Les notes dels alumnes aprovats es podran incrementar fins a 1.5 punts a fi d'assolir la distribució entre aprovats, notables, excel·lents i MHs que els professors considerin idònia.

Els alumnes que no superin l'assignatura perquè no arribin a la nota mínima de les proves de seguiment i/o dels parcials i/o examen final de recuperació obtindran una nota final màxima de 4,5, independentment de quina sigui la seva mitjana global.

Els alumnes hauran d'actuar de forma honesta al llarg del curs. Les actituds deshonestes (copiar, deixar copiar o tota acció encaminada a distorsionar una avaluació) en qualsevol prova de seguiment o examen seran motiu d'una qualificació de "Suspès" amb una nota final de 0 en l'assignatura, independentment de la resta de notes obtingudes per l'alumne. En particular, durant les proves escrites, els telèfons mòbils o qualsevol altre aparell de telecomunicació han d'estar desconnectats i guardats a les bosses o motxilles que hauran d'estar sobre la tarima. En cas que es detecti que un alumne porta algun dispositiu no autoritzat a sobre durant l'examen i/o prova de seguiment, l'alumne serà expulsat de l'aula i tindrà una qualificació de "Suspès" a l'assignatura.

### Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Avaluació continuada	40%	27	1,08	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33
Exàmens escrits	60%	5	0,2	3, 4, 5, 8, 11, 12, 13, 16, 17, 25, 26, 27, 29, 30, 31

## **Bibliografia**

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

Web del llibre: <http://www.catalysisbook.org/>

R.A. van Santen, P.W.N.M. van Leeuwen, J.A. Moulijn i B.A. Averill, *Catalysis: an integrated approach*, (2a edició), Elsevier, 2000.