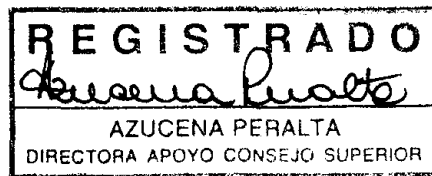




Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

APRUEBA ACTUALIZACION CURRICULAR DE CURSOS DE POSGRADO

DEROGA ORDENANZAS N° 812 y 923

Buenos Aires, 3 de julio de 2008

VISTO la solicitud de aprobación de la actualización de la currícula de los Cursos de Posgrado de Actualización para el Doctorado en Ingeniería, Mención Química, “Catálisis Ambiental”, “Desarrollo, Propiedades y Aplicaciones de Materiales Zeolíticos y Mesoporosos”, “Ingeniería de las reacciones de activación catalítica de enlaces C-C y C-H en parafinas livianas”, “Cinética Química Avanzada aplicada a Procesos Catalíticos Heterogéneos”, “Físico Química de Nuevos Materiales Nanoestructurados, Nanomateriales y Nanotecnología”, presentada por la Facultad Regional Córdoba, y

CONSIDERANDO:

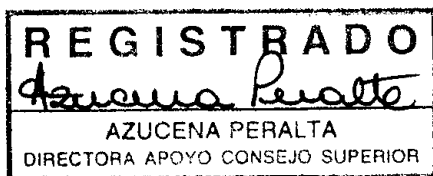
Que la Ordenanza N° 812 que aprueba los Cursos “Catálisis Ambiental”, “Catálisis por Zeolitas”, y la Ordenanza N° 923 que aprueba los Cursos “Ingeniería de las reacciones de activación catalítica de enlaces C-C y C-H en parafinas livianas”, “Cinética Química Avanzada aplicada a Procesos Catalíticos Heterogéneos”, “Físico Química de Nuevos Materiales Nanoestructurados”, requieren de ajustes y modificaciones a fin de que tanto sus fundamentos como sus aplicaciones contengan los últimos desarrollos en las áreas temáticas.

Que la Comisión de Posgrado de la Universidad ha analizado los antecedentes que acompañan la solicitud y avala la presentación.

Que la Comisión de Enseñanza recomienda su aprobación.



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

Que el dictado de la medida se efectúa en uso de las atribuciones otorgadas por el Estatuto Universitario.

Por ello,

EL CONSEJO SUPERIOR DE LA UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL

ORDENA:


ARTÍCULO 1°.- Aprobar la actualización curricular de los Cursos de Posgrado de Actualización para el Doctorado en Ingeniería, Mención Química, “Catálisis Ambiental”, “Desarrollo, Propiedades y Aplicaciones de Materiales Zeolíticos y Mesoporosos”, “Ingeniería de las reacciones de activación catalítica de enlaces C-C y C-H en parafinas livianas”, “Cinética Química Avanzada aplicada a Procesos Catalíticos Heterogéneos”, “Físico Química de Nuevos Materiales Nanoestructurados, Nanomateriales y Nanotecnología”, que figura en el Anexo I y es parte integrante de la presente ordenanza.

ARTICULO 2°.- Ratificar la autorización del dictado de los Cursos de Posgrado en la Facultad Regional Córdoba con los Cuerpos Docentes que figuran en el Anexo II y es parte integrante de la presente ordenanza

ARTICULO 3ª.- Derogar las Ordenanzas N° 812 y 923.

ARTÍCULO 4°.- Regístrese. Comuníquese y archívese.

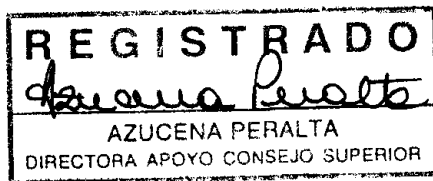
ORDENANZA N° 1196



Ing. HÉCTOR CARLOS BROTTO
RECTOR



A. O. S. RICARDO F. O. SALLER
Secretario del Consejo Superior



"2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias"



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

ORDENANZA N° 1196

ANEXO I

CURSOS DE POSGRADO DE ACTUALIZACIÓN

I - CATÁLISIS AMBIENTAL

1. Fundamentos y Justificación

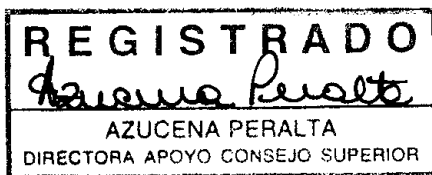
La extraordinaria importancia de la catálisis en el control medioambiental se pone de manifiesto en su intervención para paliar tres amenazas mundiales para la conservación de nuestro planeta: la lluvia ácida, el efecto invernadero y el crecimiento imparable de los vehículos de transporte. Asimismo, es una herramienta importante en las síntesis de productos en química fina y farmacéutica, coadyuvante en el diseño de procesos "verdes" más respetuosos con el medio ambiente.

Por otra parte, una asignatura multidisciplinar como la catálisis ambiental, puede servir como elemento de cohesión en un programa conjunto de posgrado de iniciación a la investigación, ya que los tópicos incluidos en ella se tratan integrando conocimientos de Termodinámica, Cinética Química, Diseño de Reactores, Mecánica de Fluidos, Transmisión de Calor, Análisis Instrumental y otros.

A lo largo del curso se estudiarán una serie de procesos químicos punteros en el campo de la investigación de materiales, analizados con las técnicas más modernas de análisis y observados desde la doble vertiente del punto de vista microscópico o fisicoquímico y macroscópico o ingenieril, permitiendo así una integración completa de todos los campos científicos abordados en el temario.



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

La protección ambiental contra la polución por emisiones de SO_x, NO_x y aromáticos, establece la necesidad de refinar las fracciones de petróleo antes de su uso en combustibles. El proceso de refinación involucra el hidrotreamiento catalítico, el cual se define como el contacto de una fracción del crudo con el hidrógeno, en presencia de un catalizador y bajo condiciones de operación adecuadas (alta presión y temperaturas entre 300 y 700 K), con el fin de prepararla para una conversión posterior y mejorar su calidad. En el HDT tienen lugar principalmente reacciones de hidrogenación de compuestos insaturados y reacciones de hidrogenólisis de los enlaces carbono-heteroátomos (azufre, metales o metaloides, nitrógeno y oxígeno). El HDT comprende los procesos de hidrodesulfurización, hidrodesmetalización, hidrogenitrogenación, hidrodesoxigenación, hidrodesaromatización y reacciones de ruptura catalítica.

La creciente contaminación de los NO_x ha llevado a las naciones tecnológicas e industrialmente más avanzadas a limitar sus emisiones. Entre los distintos métodos de tratamiento de los gases de combustión, la tecnología de catálisis ha demostrado ser un arma de gran utilidad en la eliminación de los NO_x. Así, el proceso de la Reducción Catalítica Selectiva (SCR), que utiliza amoníaco como agente reductor, es hoy en día la tecnología más utilizada industrialmente. Desde entonces múltiples sistemas han aparecido como potenciales catalizadores para tal reacción, los materiales estudiados hasta la actualidad son: cationes metálicos no reducibles pero que generaban una fuerte acidez, como por ej. Ga, cationes parcialmente reducibles (Fe, Mn, Cr) y cationes fácilmente reducibles (Cu). Los catalizadores basados en metales nobles soportados son activos a menores temperaturas. Catalizadores en base a zeolitas intercambiadas, ZSM5, ZSM11, BEA, K y L resultaron activos para la SCR de NO_x, siendo su forma protónica



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

menos activa. Diferentes hidrocarburos parafínicos livianos, han sido empleados como gases reductores.

2. Objetivos

Concientizar al estudiante de la optimización de la formulación de los catalizadores responsables de ciertas reacciones fundamentales a nivel mundial puede contribuir apreciablemente a la conservación del medio ambiente natural.

Adquirir unos conocimientos esenciales sobre la formulación científica de un catalizador, realizada sobre las bases del conocimiento físico-químico de los mecanismos moleculares implicados.

Conocer los parámetros técnicos esenciales que caracterizan a un catalizador heterogéneo y las técnicas instrumentales que posibilitan dicha caracterización.

Adquirir la capacidad de verificar un caso práctico de diseño, formulación, fabricación y caracterización de un catalizador destinado a usos de control medioambiental.

Conocer los procesos químicos actuales en los que la catálisis ambiental puede contribuir al desarrollo sostenible, en las aplicaciones de química fina, farmacéutica o industrial.

Adquirir una visión global de las técnicas de análisis precisas y de las metodologías de estudio de los procesos citados en el epígrafe anterior.

3. Contenidos mínimos

Tema I. Diseño de catalizadores.

Preparación de catalizadores. Intercambio iónico en fase líquida o sólido-sólido. Técnica inversa de micelas, y postratamiento térmico o por extracción por solventes del vehículo



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

empleado para tal fin. Encapsulado de los iones del metal por impregnación incipiente y sobre impregnación no-estequiométrica.

Caracterización de catalizadores. XRD, BET, FTIR de piridina adsorbida, SEM-EDX, XPS, NMR-MAS

Medida de actividad.

Optimización de catalizadores y rediseño en busca de sitios catalíticos requeridos en cada proceso.

Tema II. Contaminación atmosférica.

Agentes contaminantes.

Transformación catalítica de monóxido de carbono en anhídrido carbónico.

Lluvia acida.

Utilización de anhídrido carbónico como co-reactante en la activación de metano.

Métodos para la eliminación de los contaminantes: Métodos catalíticos. Tecnologías catalíticas para la depuración de gases. Métodos catalíticos de descontaminación atmosférica. Catalizadores y adsorbentes para la protección del medio ambiente.

Combustibles fósiles.

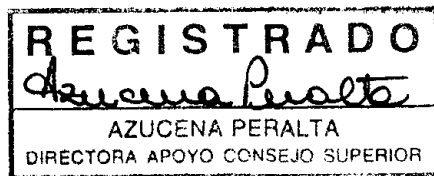
Depuración de gases emitidos por vehículos automóviles Diesel.

Eliminación de NOx emitidos por fuentes fijas.

Reducción de las emisiones de compuestos orgánicos volátiles (COVs).

Incineración de residuos sólidos urbanos. Hidrógeno: un vector energético no contaminante para automoción.





“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

Tema III. Fuentes estacionarias

Procesos DeNOx.

Fábricas de ácido nítrico. Centrales térmicas. Procesos de desulfurización.

Eliminación de compuestos orgánicos volátiles.

Recientes avances en la transformación catalítica de óxidos de nitrógeno. Reducción

Catalítica Selectiva de NOx utilizando: amoníaco, compuesto oxigenados como acetona, etanol y diferentes hidrocarburos (CH₄, C₅H₁₂, C₂H₄, C₃H₈, etc.) como agentes reductores.

Dilucidación del mecanismo de las reacciones ambientalmente factibles: a -NOx + O₂ + HC (Metano, Propano, Isobutano). b- NOx + O₂ + Oxigenados (metanol, etanol, acetona.

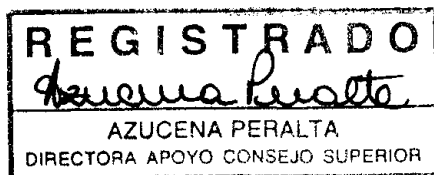
Caracterización de los catalizadores modelo por medio de la evaluación de la actividad catalítica.

Utilización de catalizadores metálicos: metales nobles, cationes no reducibles (Ga), cationes parcialmente reducibles (Fe, Mn, Cr) y cationes fácilmente reducibles (Cu).

Catalizadores en base a zeolitas intercambiadas, ZSM-5, ZSM-11, BEA, K y L y catalizadores mesoporosos del tipo H-SBA-15; H-MCM-41.

Refinamiento de fracciones de petróleo.

Eliminación de SOx, NOx y aromáticos mediante Hidrotratamiento Catalítico (HDT) de compuestos poliaromáticos. En el HDT tienen lugar principalmente reacciones de hidrogenación de compuestos insaturados y reacciones de hidrogenólisis de los enlaces carbono-heteroátomos (azufre, metales o metaloides, nitrógeno y oxígeno).



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

Tema IV. Fuentes móviles

Automóviles con motor a gasolina. Motores Diesel.

Tecnologías en desarrollo y nuevas tecnologías.

Tema V. Tecnologías catalíticas para la depuración de aguas.

Las zeolitas como intercambiadores iónicos. Zeolitas para la remoción de metales pesados en aguas contaminadas.

Utilización de carbones para el tratamiento de aguas.

Oxidación catalítica de contaminantes orgánicos en aguas.

Fotocatálisis. Detoxificación por adsorción selectiva: degradación de contaminantes persistentes en agua mediante intercambio iónico.

Retención de fluoruros. Empleo de nanocomposites (hidroxiapatita/MCM-SBA) como agentes selectores para la retención selectiva de fluoruros en aguas contaminadas.

4. Duración

CIENTO CINCUENTA (150) horas; las cuales incluyen clases teóricas y prácticas.

5. Metodología

El régimen de cursado previsto es presencial.

El cursado prevé la combinación de clases teóricas - expositivas y actividades prácticas.



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

6. Promoción

La promoción la obtienen los cursantes que, habiendo asistido con regularidad a las clases (mínimo 80% de asistencia) y cumplido con los trabajos prácticos, aprueben la evaluación final prevista.

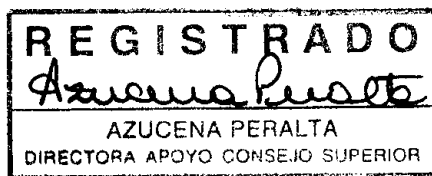
II - DESARROLLO, PROPIEDADES Y APLICACIONES DE MATERIALES ZEOLÍTICOS Y MESOPOROSOS

1. Fundamentos y Justificación

Las zeolitas son, en la actualidad, materiales de gran interés científico y tecnológico. A escala industrial se utilizan en multitud de procesos como catalizadores, adsorbentes y agentes de intercambio iónico. De acuerdo con la definición clásica, las zeolitas son aluminosilicatos cristalinos microporosos. Sin embargo, los avances científicos producidos en los últimos años han obligado a revisar dicha definición: síntesis de estructuras zeolíticas que incorporan otros cationes metálicos diferentes del aluminio, desarrollo de nuevas familias de materiales cristalinos microporosos, tales como aluminofosfatos y silicoaluminofosfatos, y preparación de materiales de mesoporosidad uniforme. Con ello, se ha ampliado enormemente el campo de posibles aplicaciones de los materiales zeolíticos.

2. Objetivos

Se pretende introducir al estudiante en el campo de las zeolitas y materiales relacionados, dada la importancia científica y tecnológica de este tipo de materiales porosos. Para ello, se pasará revista a los diferentes tipos de materiales zeolíticos,



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

estudiando sus estructuras, métodos de síntesis, propiedades y aplicaciones más relevantes y sus potencialidades para los próximos años.

Por lo tanto el objetivo Principal de este Curso de Doctorado es dar a estudiantes de postgrado una visión global de todo lo referente a los tamices moleculares cristalinos micro y mesoporosos de la familia de las Zeolitas y su Proyección en el tiempo.

3. Contenidos mínimos

I. INTRODUCCIÓN

Generalidades sobre los orígenes, el desarrollo y la actualidad de las zeolitas y sus aplicaciones

II. MATERIALES MICROPOROSOS

ESTRUCTURA: Zeolitas naturales y sintéticas; Clasificación estructural. Modelos estructurales teóricos; Materiales microporosos tipo zeolitas. Sustitución de Al y/o Si por otros elementos; Métodos de análisis estructural de materiales zeolíticos

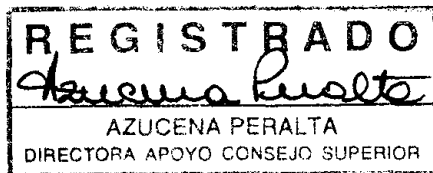
SÍNTESIS: Síntesis de zeolitas en medio natural; Síntesis hidrotérmica: Aspectos generales y principales variables,

Diagramas de fase; Química de los silicatos en disolución acuosa: Técnicas de estudio; Cinética y mecanismos de cristalización de materiales zeolíticos: Nucleación y crecimiento cristalino; Efecto de los aditivos orgánicos en la síntesis:

Efecto "template", Compuestos clatratos e hidratos cristalinos, Hidrofobicidad; Cristalización de zeolitas y predicción de estructuras basada en modelos teóricos; Ejemplos prácticos de síntesis de zeolitas: zeolitas Y y ZSM-5; Síntesis de zeotipos:



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

AIPO4-s, SAPO-s, MeAPSO-s..... Síntesis de metalosilicatos mediante sustitución isomórfica

III. MATERIALES ZEOTIPOS MESOPOROSOS ORGANIZADOS

Introducción. Aspectos generales; Mecanismos de síntesis de materiales mesoporosos ordenados. Surfactantes.

Condiciones de síntesis; Estructuras mesoporosas silíceas; Estructuras mesoporosas no silíceas; Estructuras mesoporosas funcionalizadas

IV. CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES MICRO Y MESOPOROSOS

Difracción de Rayos X; Microscopías Electrónicas de Transmisión y de Barrido; Análisis Térmico; Espectroscopías IR y UV-visible; Resonancia Magnética Nuclear; Técnicas de adsorción-desorción. Propiedades Magnéticas.

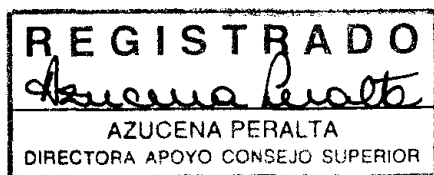
V. APLICACIONES

Intercambiadores iónicos; Adsorbentes, Desodorizantes.

VI. CATÁLISIS

Principios generales: Catálisis ácida, Catálisis básica, Catálisis redox; Catálisis ácido-base. Activación de los catalizadores. Medidas de acidez y basicidad. Indicadores ácido-base, IR, adsorción de bases o ácidos; Composición y estructura de zeolitas y zeotipos y relación con la actividad y selectividad en reacciones ácido-base. Modelos teóricos de reactividad química; Selectividad catalítica con tamices moleculares. Tipos y aplicaciones; Reacciones de catálisis ácida de interés industrial: Craqueo catalítico, Alquilación de olefinas ligeras, Isomerización; Catálisis redox con zeotipos: Oxidaciones selectivas; Catálisis bifuncional con zeolitas y zeotipos; Zeolitas como catalizadores biomiméticos; Catálisis estereoselectiva; Complejos en zeolitas.





"2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias"



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

VII. NUEVOS DESARROLLOS EN LA FÍSICO-QUÍMICA DE MATERIALES ZEOLÍTICOS

Físico-Química huésped-anfitrión en tamices moleculares: inclusión de polímeros, clusters y complejos metálicos; Diseño molecular de materiales zeolíticos nanométricos.

Aplicaciones

4. Duración

CIENTO CINCUENTA (150) horas; las cuales incluyen clases teóricas y prácticas.

5. Metodología

El régimen de cursado previsto es presencial.

El cursado prevé la combinación de clases teóricas - expositivas y actividades prácticas.

6. Promoción

La promoción la obtienen los cursantes que, habiendo asistido con regularidad a las clases (mínimo 80% de asistencia) y cumplido con los trabajos prácticos, aprueben la evaluación final prevista.

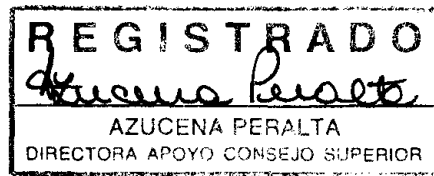
III - INGENIERÍA DE LAS REACCIONES DE ACTIVACIÓN CATALÍTICA DE ENLACES C-C Y C-H EN PARAFINAS LIVIANAS

1. Fundamentos y Justificación

En los últimos años la industria moderna tiende hacia un cambio en los materiales base, así, se espera que el Gas Natural (GN) llegue a ser una materia prima para diversos procesos de la industria química que pueda desplazar a los hidrocarburos líquidos



*Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado*



"2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias"

produciendo una reestructuración de la economía mundial. Las condiciones de reacción extremas necesarias para lograr la activación de metano (C1) pueden reducirse mediante el uso de agentes oxidantes, pero con muy baja selectividad a productos deseados. En este sentido, el empleo de catalizadores zeolíticos y la incorporación de aditivos en la alimentación, ha favorecido el rendimiento a Hidrocarburos Aromáticos. Evidentemente entre los procesos antes enunciados, el proceso de conversión directa de metano a hidrocarburos líquidos es aun un desafío. En este sentido la activación selectiva de metano en un paso sin empleo de cupla oxidativa es una de las últimas barreras de la ciencia y la tecnología catalítica. Este hecho puede ser comparado con lo que ocurriera el siglo pasado cuando parecía imposible obtener amoníaco a partir de nitrógeno e hidrógeno en un solo paso.

2. Objetivos

Formar en las especialidades de los derivados parafínicos del Petróleo y del Gas Natural a profesionales de la ingeniería de distintas disciplinas y licenciados de carreras científicas de manera que alcancen el manejo global y específico de los conocimientos requeridos para desarrollar investigaciones aplicadas a la problemática del aprovechamiento integral de parafinas de carbono 1 a carbono 7, todas con bajo valor de mercado pero potencialmente útiles para la generación de nuevos productos de mayor valor agregado, e Hidrogeno Limpio.

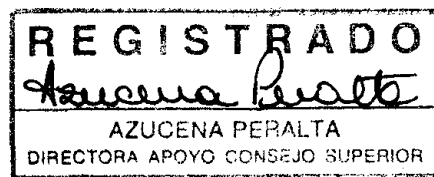
3. Contenidos mínimos

Tema 1: Introducción





Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

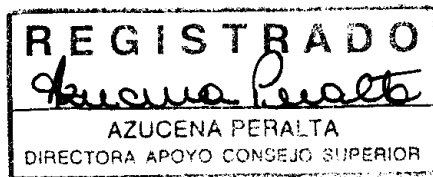
Activación del enlace C-C y C-H. Una interpretación mecánico cuántica. Barreras de energía por la aplicación de orbitales moleculares. Aspectos termodinámicos. Aspectos cinéticos, Una alternativa energética por aplicación de escalones de energía. Influencia de los estados de transición. Influencia de sólidos activos. Barreras de energía de activación. Influencia del calor de adsorción.

Tema 2: Mecanismos de activación de parafinas livianas

Pasos esenciales, Dehidrogenación. Oligomerización, incluyendo dehidrociclización/ oligomerización, craqueo, hidrogenólisis y transferencia de hidrógeno como pasoso en paralelo. Conversión de pentanos. Conversión de hexanos. Conversión de heptanos. Conversión etano y propano. Empleo de alcanos livianos como C2 y C3, alquenos o naftenicos para la activación de C1. Influencia del complejo EDA (electrón-donor-aceptor) de los orbitales *d*- semi ocupados de las especies activas de los catalizadores. Efecto de la concentración de sitios aceptores de electrones y funciones cesoras de protones. Mecanismos en un paso. Mecanismo de dos pasos. Generación paralela de hidrocarburos aromáticos e Hidrogeno.

Tema 3: Tipos de conversiones catalíticas para la activación de Parafinas Livianas

Análisis Teóricos: 1. Dehidrogenación/aromatización usando catalizadores en base a platino/alumina solo para parafinas de mas de 5 átomos de carbono. 2. Catalizadores ácidos, proceso M2/Forming. 3. Innovación en la conversión directa de Gas Natural por dehidrogenación oligmerización/aromatización. Empleo de gases licuados de petróleo (C3+C4) como coreactantes. Empleo de gasolina liviana (C5+C6) como co-reactantes.



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

Tema 4: Nuevas Rutas hacia la activación de Metano y Gas Natural con generación paralela de H₂ limpio.

Aplicación de catalizadores zeolíticos modificados a media para la reacción de activación-polimerización-aromatización de enlaces C-C y C-H de metano y Gas Natural. Modificación de los catalizadores por aplicación de métodos de post-síntesis. Generación de funciones activas preestablecidas por conocimiento de la naturaleza de sitio activo necesario para cada reacción a aplicar: Influencia de las principales modificaciones de las funciones activas: Zn, Ga, Cr, Cu, Pd, Pt, Mn, Mo, Li, Na. Caracterización de los catalizadores empleados. Aplicación de técnicas de XRD, NMR-MAS, TG-DTA, TPD, SEM-EDX, FT-IR, PAC (Correlación de las Perturbaciones Anulares) y Área Superficial. Relación actividad- estructura. Generación de aromáticos e H₂ limpio en elevada proporción

Tema 5: Estudio de la activación de C₁ con n-pentano e i-pentano.

Evaluación de catalizadores zeolíticos (MFI, MEL, BEA y MCM) modificados con Mo, Zn, In y Fe. Análisis de la influencia de la temperatura de reacción. Análisis de la influencia de las velocidades espaciales. Análisis de la influencia de la composición de la alimentación. Determinación de especies reactivas primarias e intermediarios activos por análisis in-situ empleando FT-IR. Determinación de la relación entre naturaleza de sitio activo/actividad catalítica

Tema 6: Estudio de la activación de C₁ con hexanos.

Evaluación de catalizadores zeolíticos (MFI, MEL, BEA y MCM) modificados Mo, Zn, In y Fe. Análisis de la influencia de la temperatura de reacción. Análisis de la influencia de las velocidades espaciales. Análisis de la influencia de la composición de la alimentación.



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

Determinación de especies reactivas primarias e intermediarios activos por análisis in-situ empleando FT-IR. Determinación de la relación entre naturaleza de sitio activo/actividad catalítica

Tema 7: Estudio de la activación de C1 y Gas Natural con n-pentano y hexanos

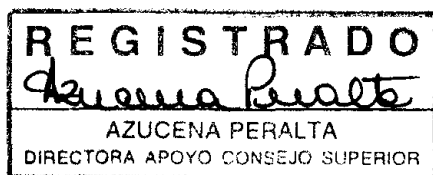
Selección del catalizador más eficaz en base a los resultados obtenidos en los temas anteriores. Análisis de la influencia de la temperatura de reacción. Análisis de la influencia de las velocidades espaciales. Desarrollo del sistema catalítico (alimentación-catalizador-condiciones operativas) mas apto para la eficaz transformación de Gas Natural en productos de mayor valor agregado, sean Hidrocarburos Aromáticos e Hidrogeno o Hidrocarburos en el rango del Gas-Oil.

Tema 8: Evaluación de la Influencia de las condiciones de entorno y optimización del proceso

Influencia de la composición del material del reactor. Influencia de la reacción en fase homogénea. Condiciones de minimización de las reacciones homogéneas. Aprovechamiento de las reacciones homogéneas. Efectos de la temperatura de reacción, presiones parciales, tiempo de residencia, tiempo de contacto, tiempo de reacción, presión total, según el tipo de catalizador empleado, en búsqueda de las condiciones más favorables para acoplar reacciones en fase homogénea y heterogénea. Aplicación de Diseño de experimentos empleando más de 4 factores, con 1 y 2 funciones objetivo a optimizar por empleo de Respuesta de Diseño de Respuesta de Superficie.

4. Duración

CIENTO VEINTE (120) horas; las cuales incluyen clases teóricas y prácticas.



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

5. Metodología

El régimen de cursado previsto es presencial.

El cursado prevé la combinación de clases teóricas - expositivas y actividades prácticas.

6. Promoción

La promoción la obtienen los cursantes que, habiendo asistido con regularidad a las clases (mínimo 80% de asistencia) y cumplido con los trabajos prácticos, aprueben la evaluación final prevista.

IV - CINÉTICA QUÍMICA AVANZADA APLICADA A PROCESOS CATALÍTICOS HETEROGÉNEOS

1. Fundamentos y Justificación

Las reacciones químicas pueden ocurrir rápidamente o lentamente. Las explosiones del trinitrotolueno (TNT) ocurren en milisegundos mientras que el oxidar del hierro ocurre en días o años dependiendo de las condiciones. El índice de cualquier reacción química puede ser rápido o lento dependiendo de las condiciones bajo las cuales esa reacción ocurre. Las determinaciones cuantitativas del índice de una reacción química son necesarias para permitir la exploración cuantitativa del efecto de las condiciones de reacción.

Aunque algunos de los términos usados en cinética química son de uso común, otros no. En catálisis heterogénea, todas las sustancias que entran en los pasos del mecanismo de una reacción química pueden, y generalmente, afectar los índices de esos pasos del



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



"2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias"

mecanismo pero se regeneran en otros pasos posteriores pero afectando el índice de la reacción, se llaman los catalizadores. El proceso por el cual un catalizador acelera el índice de una reacción, o cataliza una reacción, se llama catálisis. Cualquier sustancia que prevenga o inhibe el efecto de aceleración normal de un catalizador se llama un inhibidor del catalizador. El objeto de la cinética química avanzada aplicada a la catálisis heterogénea es entender la sucesión de los pasos de reacción que hacen que entendamos el mecanismo de una reacción química en el nivel molecular. En el estudio de las reacciones en fase gas o líquida sobre sólidos activos (catalizadores), la información está generalmente disponible solamente en términos de observaciones respecto a cantidades molares macroscópicas. El comportamiento químico en el nivel molecular se debe deducir de comportamiento químico en el nivel molar.

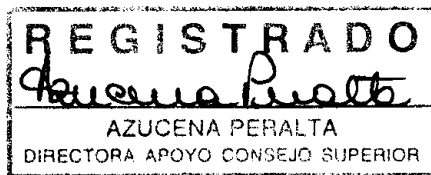
2. Objetivos

Distinguir las diferencias principales y los lazos entre la cinética química en fase homogénea y heterogénea.

Entender el concepto de orden de la reacción heterogénea y analizar datos experimentales de la reacción para obtener parámetros cinéticos y las expresiones de velocidad;

Obtener diseños preliminares de reactores ideales dinámicos y en batch para las reacciones simples y sistemas complejos de reacción.

Derivar los modelos de velocidad a un centro y a varios centros activos para catalizadores porosos.



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

Analizar los cambios que se pueden esperar para las condiciones transitorias en función de la naturaleza de la superficie activa expuesta y cuando las condiciones de flujo no son ideales.

Entender la influencia de los conceptos de la catálisis y del transporte de masa en fase gas o líquido sobre superficies con heterogeneidad de sitios y recorridos libres medios para sistemas heterogéneos, como así también las reacciones en medios porosos;

Utilizar los principios de base de la cinética química avanzada en relación a sistemas de reacción complejos, con énfasis en reacciones catalíticas y catalizadores heterogéneos.

Desarrollar habilidades para solucionar problemas; pensamiento crítico, e incursión en la dinámica de grupos.

3. Contenidos mínimos

Tema 1: Correlaciones empíricas. Modelos cinéticos formales.

Tema 2: Energías aparente de activación. Energía de la reacción superficial. Calor de quimisorción.

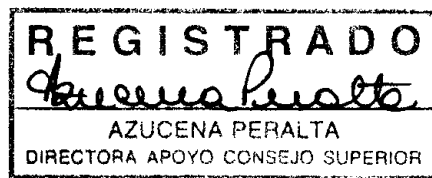
Tema 3: Modelo cinéticos en dos pasos. Mezcla reactantes. Usos y limitaciones. Compensación y falsa compensación. Modelo de Boudart. Análisis de curvas Vulcano. Aplicaciones a casos reales.

Tema 4: Modelos cinéticos para catalizadores ácidos. Empleo de la herramienta denominada α Test.

Tema 5: Modelos cinéticos para catalizadores redox. Velocidad de oxidacion. Velocidades de reoxidacion. Modelos de Mac Veen y Bremer



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

Tema 6: Nuevo modelo de regionalización de velocidades de formación de productos (en función de tipo y naturaleza de sitios activos) para reacciones unimoleculares (ERRA-1).

Tema 7: Nuevo modelo de regionalización de velocidades de formación de productos (en función de tipo y naturaleza de sitios activos) para reacciones bimoleculares concertadas (ERRA-2). Interpretación de las implicancias de las teorías de la mecánica cuántica sobre ambos métodos (por ejemplo: teoría de Fukui, supra-supra; antara-antara; supra-antara) y relación con las reacciones permitidas y prohibidas por temperatura o energía.

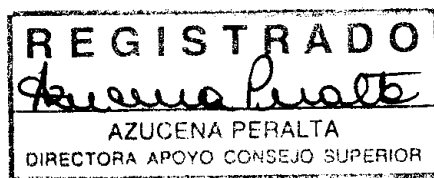
Tema 8: Determinación de constantes de velocidad para reacciones heterogéneas gas-sólido y líquido-sólido

Tema 9: Modelos Cinéticos aplicados a catálisis heterogénea. Procesos Industriales: Hidrotratamiento catalítico. Determinación de la Cinética de la hidrogenación de hidrocarburos poliaromáticos. Hidrogenación de fenantreno, naftaleno, tetraleno utilizando un catalizador comercial NiMo/alúmina. Comparación con otros catalizadores de hidrogenación que utilizan metales nobles: Pt, Pd, Ir, Ru. Mecanismo de Langmuir-Hinshelwood. Determinación de las constantes de adsorción. Estudio del efecto de competencia e inhibición entre reactantes y productos.

Tema 10: Modelos Cinéticos aplicados a catálisis heterogénea. Procesos Industriales: Hidrotratamiento catalítico: Hidrodesulfurización (HDS) e Hidrodenitrogenación (HDN) de gas oil. Determinación de las constantes cinéticas de la hidrodenitrogenación de quinolina, tetrahydroquinolina, indol, indolina, amoniaco, etc. Hidrodesulfurización de dibenzotiofeno y 4,6-dimetildibenzotiofeno utilizando catalizadores comerciales. Comparación con nuevos catalizadores para HDN y HDS. Aplicación del modelo de



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

Langmuir-Hinshelwood, comparación con otros modelos cinéticos. Determinación de las constantes de adsorción. Estudio del efecto de competencia e inhibición.

Tema 11: Modelado cinético de la síntesis de 2-metil, 1-4 naftoquinona (vitamina K3). Pasos elementales. Reacción Global. Determinación de las constantes de velocidad. Aplicación de modelos de optimización por Aplicación de Respuesta de Superficie. Confrontación con los resultados cinéticos.

Tema 12: Evaluación de las constantes de velocidad en función del Turn Over Number y del Turn Over Frequency. Identificación de sitios activos. Aplicación a reacciones a un sitio y a reacciones concertadas a dos sitios espacialmente cercanos. Ventajas comparativas. Rediseño de los sitios activos en base a sus valores. Compromiso entre Rendimiento y selectividad. Criterio de Space-Time-Yield.

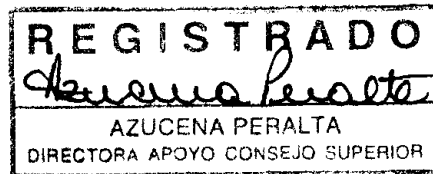
Tema 13: Reactores catalíticos: Reacciones simples y múltiples en reactores continuos y batch. Selectividad y producción. Reacciones en serie. Reacciones paralelas. Redes complejas de la reacción. Densidad constante y variable. Reactores No-isotérmicos. Efectos de la energía y de la temperatura sobre el funcionamiento y el diseño de los reactores catalíticos para las reacciones simples y múltiples. Reacciones catalíticas. Catalizadores porosos. Transporte y reacción totales. Difusión del poro. Factor de la eficacia. Diseño de reactores heterogéneos. Reactores de lecho fijo. Reactores No-ideales. Distribución del Tiempo de Residencia. Dispersión axial en PFTR. SCTcRs en series. Reactores cromatográficos.

4. Duración

CIEN (100) horas; las cuales incluyen clases teóricas y prácticas.



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



"2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias"

5. Metodología

El régimen de cursado previsto es presencial.

El cursado prevé la combinación de clases teóricas - expositivas y actividades prácticas.

6. Promoción

La promoción la obtienen los cursantes que, habiendo asistido con regularidad a las clases (mínimo 80% de asistencia) y cumplido con los trabajos prácticos, aprueben la evaluación final prevista.

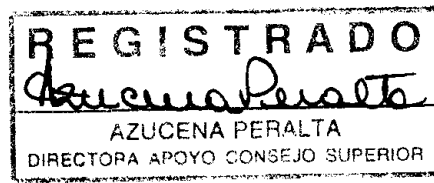
V - FÍSICO QUÍMICA DE NUEVOS MATERIALES NANOESTRUCTURADOS, NANOMATERIALES Y NANOTECNOLOGÍA

1. Fundamentos y Justificación

Los nanomateriales, entre ellos las zeolitas (las más pequeñas plantas químicas conocidas) son materiales cristalinos que presentan cavidades del orden de nanómetros que pueden ser usadas como verdaderos reactores químicos, al permitir un exacto control sobre los productos, creando sustancias que son imposibles de obtener por otros métodos. Pueden considerarse formados por nanotubos, todos de la misma forma y tamaño. Las principales aplicaciones son: como sensores químicos los que ya están bajo desarrollo. Ellas pueden detectar la presencia de minúsculas cantidades de toxinas o contaminantes y discriminarlos respondiendo a una molécula particular y no a otra. Otra aplicación más tentadora pero al mismo tiempo más complicada es la utilización para dispositivos ópticos y eléctricos, tales como "alambres moleculares" (polímeros



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

conductores) que servirían como pequeños conductores a los chips de computadoras y semiconductores de escala nanométrica para su uso en transistores ópticos. La capacidad para controlar la reacción hace que los nanomateriales sean únicos para la manufactura de tales procesos de miniatura.

La incursión en la nanotecnología a través de los nanomateriales es una estrategia factible y de rigurosa actualidad, formando parte ambas alternativas de la denominada III Revolución Industrial a partir del discurso de Clinton en junio de 2000. Un área de conocimiento de tal influencia sobre varias disciplinas ha tenido un enorme crecimiento en los últimos cuatro años. Como consecuencia de esto, existe una gran deficiencia de profesionales e investigadores preparados en esta área, fundamentalmente en nuestro país y Latinoamérica. Por este motivo, la preparación de recursos humanos capaces de trabajar en estas áreas, con técnicas y metodologías de actualidad, es de enorme importancia en la mayor parte de las áreas de la química: ingeniería química, química inorgánica, química orgánica, y en la fisicoquímica de los materiales.

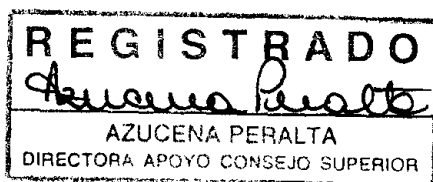
Recientemente se han realizado estudios orientados al desarrollo de materiales mesoporosos nanoestructurados en base a Carbono, con elevada actividad conductora, susceptibles de ser controlados, por modificación de tamaño de poros, espesor de pared, longitud de cristales, etc., generando una nueva familia de Materiales en Base a Carbono denominada CMK.

2. Objetivo

El objeto de este curso es la formación de recursos humanos en la preparación, caracterización, síntesis, propiedades electrónicas, magnéticas, ópticas y aplicación en



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

catálisis, recubrimiento, almacenamiento de información, sensores biológicos, sensores ambientales, reservorios de H₂, semiconductores orgánicos y separación de contaminantes ambientales empleando materiales nanoestructurados.

3. Contenidos mínimos

Tema 1: Introducción

Definición de Nanotecnología. Impacto de la nanotecnología. Materiales microporosos y mesoporosos. Su manufactura. Nanoelectrónica y tecnología de computadoras. Medicina y salud. Energía y ambiente. Biotecnología y agricultura.

Tema 2: Microestructuras porosas nanoestructuradas

Avances en la optimización de materiales microporosos. Factores que determinan el tipo de material sintetizado. Composición del gel. Fuente de la silicio y de aluminio u otro heteroátomo (Ti, Fe, V, Ga, B). Efecto de otros reactantes presentes -por ejemplo concentración de OH⁻. Cationes inorgánicos y orgánicos o templates. Tiempo de la reacción. Temperatura y velocidad de calentamiento. Presión. Condiciones de la síntesis (como el orden agregado de los reactantes, del envejecimiento del gel y de la agitación) y métodos de modificación post-síntesis. Fisicoquímica de la generación de los núcleos y cristales. Caracterización fisicoquímica del material optimizado. Aplicaciones.

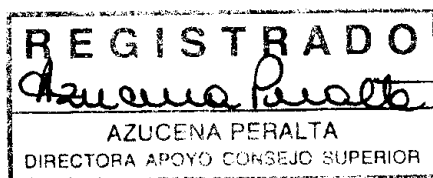
Tema 3: Mesoestructuras porosas nanoestructuradas

Características generales. Diferencias entre materiales micro y meso porosos. Diferenciación fisicoquímica. Fisicoquímica de la generación de orientadores espaciales de estructuras. Mecanismos de reacción sólido-sólido y líquido-sólido.

Tema 4: Inclusión química



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

Concepto de inclusión química, concepto hospedaje-huésped, enumeración general de los distintos tipos de inclusión en materiales mesoporosos (principalmente MCM, SBA, CMK), características y algunas aplicaciones.

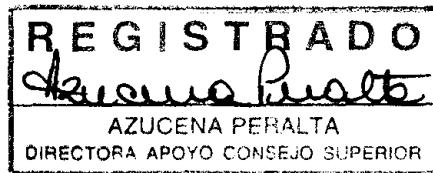
Tema 5: Síntesis de materiales de la familia M41S, SBA y CMK

Características de los miembros más conocidos de la familia de las MCM (MCM-41 y MCM-48), de las SBA (SBA-1, SBA-3, SBA-15, SBA-16) y de la CMK (CMK-1, CMK-2, CMK-3, CMK-5). Descripción de distintos métodos de síntesis: Hidrotérmico, sol-gel, temperatura programada, y a presión atmosférica por el agregado de aceleradores de gelificación. Influencia de la naturaleza de la fuente de Si y del heteroátomo (Al, Ti, V) para el caso de la MCM y SBA. Influencia de la naturaleza del agente plantilla. Dilucidación de posibles mecanismos de síntesis. Análisis de distintas variables de síntesis, tales como: tiempo, temperatura, concentración de agente plantilla, agregado de surfactantes, relaciones molares heteroátomo/Si, plantilla/Si y agua/Si, pH de síntesis. Descripción de tratamientos post-síntesis para remover el agente plantilla. Modificación de los materiales mediante introducción de cationes como contra-ion por métodos de intercambio iónico e impregnación.

CMK: Introducir algunas ideas acerca de los materiales de carbono poroso. Tipos y características. Preparación de los materiales de carbono mesoporosos mediante la técnica del modelo. Fabricación de carbono macroporoso (>50 nm). Materiales usados como moldes: Empaquetamientos de esferas de poliestireno o de sílice (Diámetro < 1 micra). Modos de introducción del precursor de carbono dentro de la matriz de sílice (Técnica del moldeo). Mediante impregnación con un polímero o prepolímero en fase líquida. Mediante introducción de un prepolímero en fase vapor. VDP (Vapor Deposition



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

Polimerisation). CVD (Chemical Vapor Deposition). Tipos de moldes usados para la preparación de carbono mesoporoso. Sólidos porosos inorgánicos con una porosidad en el rango de los mesoporos (2-20 nm). Materiales de sílice porosa del tipo de la silicagel. Materiales de sílice mesoestructurada. Mayor control de la porosidad formada (orden). - Control del tamaño de poro - Control de la porosidad - Control del tamaño de partícula. Moldes de sílice mesoestructurada. Interconexión entre los poros de la sílice para obtener una buena replica de carbono poroso. Materiales mesoporosos altamente ordenados. CMK- 3; CMK-1; CMK-15.

Tema 6: Caracterización fisicoquímica de los materiales de la familia M41S, SBA y CMK

Difracción de rayos X: Empleo de los patrones de difracción de rayos X de las muestras para identificar las distintas fases; determinación de grado de regularidad estructural, distancia entre centro de poros y diámetro de poro. Microscopia de barrido electrónico (SEM). Estudios de área superficial BET. Determinación de volumen de poro, tamaño y distribución de tamaño de poro. Análisis Infrarrojo con Transformada de Fourier: Preparación de pastillas de muestra autoconsistentes y diluida en KBr; identificación de bandas características; Correlación FTIR-XRD para determinación de regularidad estructural. Análisis de resonancia magnética nuclear de estado sólido (MAS-NMR) (para núcleos de ^{27}Al , ^{29}Si , ^{13}C). Interpretación de espectros XAFS (absorción de rayos X en estructura fina) realizados en Mat. Scie. División. Berkeley Lab., y LURE Universidad de Paris Sud, para determinar estado de coordinación y análisis poblacional de primeros y segundos vecinos de diferentes heteroátomos como por ejemplo Ti, Fe, V, etc. Estudios de barrido calorimétrico diferencial, análisis térmicos diferenciales, y termodesorción programada



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”



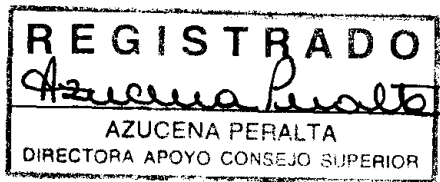
Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

Tema 7: *Evaluación de actividad catalítica y separación de contaminantes ambientales*

Introducción de distintos sitios activos en los materiales. Funciones ácidas, básicas, redox y con capacidad de adsorción de contaminantes en aire y agua: Evaluación de reacciones sondas de sustratos voluminosos catalizadas por ácidos. Funciones de oxidación: Evaluación de reacciones de síntesis de 2metil 1-4 naftoquinona (vitamina K3) y diacetilo (2-3 butanodiona).

Tema 8: *Fisicoquímica de composites MCM y SBA-huéspedes poliméricos*

Fundamentos para la preparación de estos compuestos. Avances tecnológicos que los mismos implican. Concepto hospedaje-huésped aplicado a dichos materiales compuestos. Enumeración de los distintos monómeros y método de introducción del mismo. Polimerización in situ. Evaluación de agentes iniciadores de cadena. Evaluación de propiedades físico-químicas de los materiales mixtos: Estabilidad química, determinación de temperatura de transición vítrea, determinación de conductividad, c.c. Desarrollo de nanoconductores de polianilina (PANI) y nuevos materiales compuestos (nanocomposites) de polianilina-hospedaje. Síntesis de polianilina in-situ dentro de los canales de los hospedajes de la familia de MCM y SBA. Caracterización de Polianilina contenida en aluminosilicatos mesoporosos del tipo MCM y SBA. Naturaleza de la Interacción PANI-Reservorio. Determinación de los sitios de anclaje. CMK: Propiedades estructurales de los xerogeles de sílice y de las replicas de carbono. Propiedades estructurales de los carbonos mesoporosos obtenidos a partir de los xerogeles de sílice. Características idóneas de los electrodos de carbono. Elevada área interfacial (Alta capacidad de almacenamiento de energía). Accesibilidad a la superficie (poros grandes)



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”



*Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado*

(Fácil disponibilidad de la energía almacenada = Alta potencia). Conductividad eléctrica.

Importancia del control de las características

texturales. Adaptar las características del material a los requerimientos de la aplicación.

Minimizar las restricciones difusionales.

4. Duración

CIENTO VEINTE (120) horas; las cuales incluyen clases teóricas y prácticas.

5. Metodología

El régimen de cursado previsto es presencial.

El cursado prevé la combinación de clases teóricas - expositivas y actividades prácticas.

6. Promoción

La promoción la obtienen los cursantes que, habiendo asistido con regularidad a las clases (mínimo 80% de asistencia) y cumplido con los trabajos prácticos, aprueben la evaluación final prevista.



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

ORDENANZA N° 1196

ANEXO II

**CURSOS DE POSGRADO DE ACTUALIZACIÓN
EN LA FACULTAD REGIONAL CÓRDOBA**

I - CATÁLISIS AMBIENTAL

Cuerpo académico

- Oscar ANUNZIATA

Licenciado en Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba.

Doctor en Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba

Profesor Titular en Universidad Tecnológica Nacional.

Investigador Principal del CONICET.

Categoría I en Programa de Incentivos a Docentes Investigadores.

Director del Doctorado en Facultad Regional Córdoba, UTN.

Dirección de tesis de maestría y doctorado.

Dirección de becarios e investigadores formados y en formación.

Miembro de jurado de tesis de posgrado.

- Andrea BELTRAMONE

Ingeniera Química, Universidad Tecnológica Nacional

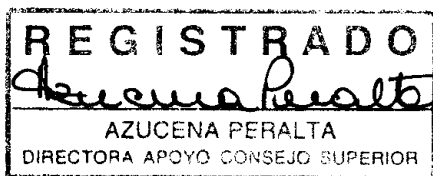
Magíster en Ingeniería Ambiental, Universidad Tecnológica Nacional

Doctora en Ingeniería, Universidad Tecnológica Nacional

Profesora Adjunta en Universidad Tecnológica Nacional.



Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

Investigadora Adjunta de CONICET.

Categoría III en Programa de Incentivos a Docentes Investigadores,

Dirección de tesis de posgrado.

Dirección de becarios, pasantes, investigadores formados y en formación.

Miembro de jurados de tesis de posgrado.

II - DESARROLLO, PROPIEDADES Y APLICACIONES DE MATERIALES ZEOLÍTICOS Y MESOPOROSOS

Cuerpo académico

- Oscar ANUNZIATA
- Andrea BELTRAMONE
- Marcos GÓMEZ COSTA

Ingeniero Químico, Universidad Tecnológica Nacional.

Doctor en Ingeniería, Universidad Tecnológica Nacional.

Profesor en Universidad Tecnológica Nacional.

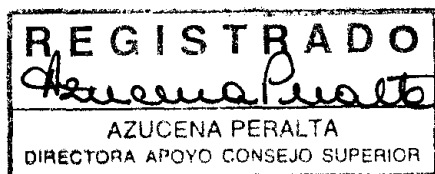
III - INGENIERÍA DE LAS REACCIONES DE ACTIVACIÓN CATALÍTICA DE ENLACES C-C Y C-H EN PARAFINAS LIVIANAS

Cuerpo académico

- Oscar ANUNZIATA
- Andrea BELTRAMONE



*Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado*



“2008 – Año de la Enseñanza de las Ciencias”

**IV - CINÉTICA QUÍMICA AVANZADA APLICADA A PROCESOS CATALÍTICOS
HETEROGÉNEOS**

Cuerpo académico

- Oscar ANUNZIATA
- Andrea BELTRAMONE

**V - FÍSICO QUÍMICA DE NUEVOS MATERIALES NANOESTRUCTURADOS,
NANOMATERIALES Y NANOTECNOLOGÍA**

Cuerpo académico

- Oscar ANUNZIATA
- Marcos GÓMEZ COSTA
