REGISTRADO

Firmado digitalmente por HUEL PABLO ARIEL
Fecha: 2020.11.10 11:10:09 -03'00'

PABLO A. HUEL

JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

APRUEBA ACTUALIZACIÓN DE CURSOS DE POSGRADO DEL DOCTORADO EN INGENIERÍA, MENCIÓN QUÍMICA

Buenos Aires, 29 de octubre de 2020

VISTO la Resolución N° 825/20 del Decano ad referéndum del Consejo Directivo de la Facultad Regional Córdoba, a través de la cual solicita la actualización de los Cursos de Posgrado "Avances en el Diseño de Experimentos y Optimización de Procesos", "Catálisis Ambiental", "Cinética Química Avanzada aplicada a Procesos Catalíticos Heterogéneos" y "Físico Química de nuevos Materiales Nanoestructurados, Nanomateriales y Nanotecnología" para el Doctorado en Ingeniería, mención Química, y

CONSIDERANDO:

Que el Consejo Superior autorizó por Resolución Nº 1525/09 el dictado de la carrera de Doctorado en Ingeniería, mención Química en la Facultad Regional Córdoba.

Que el Consejo Superior aprobó por Ordenanza N° 1247 el Curso de Actualización de Posgrado "Avances en el Diseño de Experimentos y Optimización de Procesos", entre otros, y por Ordenanza Nº 1196, la actualización curricular de los Cursos de Posgrado "Catálisis Ambiental", "Cinética Química Avanzada aplicada a Procesos Catalíticos Heterogéneos" y "Físico Química de nuevos Materiales Nanoestructurados, Nanomateriales y Nanotecnología", entre otros.

Que la Facultad Regional Córdoba platea la necesidad de actualizar los contenidos y carga horaria de los citados cursos, contando para ello con un plantel de profesores de elevado nivel académico y profesional, además de una prolongada y amplia experiencia en el dictado de cursos y seminarios vinculados al propuesto.

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

R E G I S T R A D O

PABLO A. HUEL

JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

Posgrado recomienda su aprobación.

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 del currículo de los Cursos de Posgrado "Avances en el Diseño de Experimentos y Optimización de Procesos", "Catálisis Ambiental", "Cinética Química Avanzada aplicada a Procesos Catalíticos Heterogéneos" y "Físico Química de nuevos Materiales Nanoestructurados, Nanomateriales y Nanotecnología" aprobados por Ordenanzas C.S. N° 1247 y 1196, que figuran en el Anexo I y son parte integrante de la presente Ordenanza.

ARTICULO 2º.- Autorizar el dictado de los mencionados Cursos en la Facultad Regional Córdoba, para el Doctorado en Ingeniería, mención Química, con el Cuerpo Docente que figura en el Anexo II y es parte integrante de la presente Ordenanza.

ARTÍCULO 3°.- Establecer que la propuesta mencionada en el Articulo precedente quedará supeditada al cronograma de dictado de las correspondientes actividades académicas de la Facultad Regional.

ARTÍCULO 4°.- Regístrese. Comuníquese y archívese.

ORDENANZA Nº 1788

UTN
DO
f.c.r.
l.p.

ING. MIGUEL ÁNGEL SOSA
Secretario General

ING. HÉCTOR EDUARDO AIASSA
RECTOR

R E G I S T R A D O

PABLO A. HUEL

JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

ORDENANZA Nº 1788

ANEXO I

CURSOS DE ACTUALIZACIÓN DE POSGRADO

DOCTORADO EN INGENIERÍA, MENCIÓN QUÍMICA

I. AVANCES EN EL DISEÑO DE EXPERIMENTOS Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS

1. FUNDAMENTACIÓN

La mejora de un proceso representa un reto para las industrias, éstas invierten una cantidad importante de capital con ese fin. El destino de esos recursos se orienta a la compra de nueva maquinaria, a la capacitación del personal, y al esfuerzo por alcanzar estándares de calidad más competitivos. Sin embargo, en los países emergentes, se destina poco dinero al desarrollo de tecnología, aunque en la actualidad existe un promisorio acercamiento entre las universidades y las empresas para alentar la investigación con el fin de propiciar el desarrollo y la innovación tecnológica. En resumen, la finalidad principal de muchas empresas es desarrollar nuevos procesos y productos o la mejora continua de éstos. La calidad global de los productos está representada por numerosas características y éstas a la vez, son función de un conjunto de factores a ser controlados. Para obtener el valor de respuesta de esas características se recurre a una estrategia experimental. El tipo de diseño que se utiliza involucra los factores de interés con el fin de encontrar la combinación que corresponda de la mejor forma a todas las características. Este proceso se le conoce como un diseño de optimización.

Los orígenes del diseño experimental se remontan a las primeras décadas del siglo XX, cuando Ronald Fisher, en su libro "The Design of Experiments" introduce el concepto de aleatorización y el análisis de varianza. En estos últimos años, la teoría y aplicaciones del diseño de experimentos se consolidaron y expandieron, aplicándose con éxito particularmente, por la

REGISTRADO

PABLO A. HUEL

JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

contribución "Quality Engineering in Production Systems" de Genichi Taguchi.

Existe una gran variedad de situaciones donde es de vital importancia el desarrollo de metodologías para la optimización de respuestas, como son la maximización de un rendimiento, la minimización de una función de costos o sujeto a un presupuesto específico, la minimización de un tiempo de ejecución, la optimización de una característica de calidad de un producto, etc., teniendo así aplicaciones en áreas tan diversas como ciencias físicas, químicas, biológicas, sociales, clínicas, ingeniería, economía e investigación de mercados.

La metodología superficie de respuesta (RSM, por sus siglas en inglés, Response Surface Methodology) es un modelo útil para estudiar el efecto de varios factores que influencian la respuesta variándolos simultáneamente. La metodología superficie de respuesta fue formulada originalmente por Box y Wilson. RSM es un modelo útil para estudiar con pocas experiencias el efecto de varios factores sobre la respuesta.

Específicamente, el diseño superficie de respuesta se clasifica como un método simultáneo, siendo utilizado en la etapa de la optimización. Su aplicación permite seleccionar la combinación óptima de niveles, para obtener la mejor respuesta para una condición específica. En la RSM, se realizan los diseños factoriales y los resultados se ajustan usando modelos matemáticos. Estas etapas se conocen respectivamente como etapas de desplazamiento y de diseño, éstas se repiten varias veces, definiendo la superficie de respuesta obtenida en la dirección de la región del punto óptimo. La superficie de respuesta examina la respuesta permitiéndonos:

- Determinar la combinación de los niveles de factores que proporciona una conveniente condición operativa.
- Encontrar la combinación de niveles que proporcionen mejoras económicas.
- Investigar la influencia conjunta de los factores en la/s variable/s de respuesta/s.

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

2. JUSTIFICACIÓN

La aplicación de Diseño de experimentos resulta muy beneficiosa para el tratamiento de los datos experimentales obtenidos en el proceso de formación de los estudiantes de la carrera de Doctorado en Ingeniería. El método de diseño de experimentos es eficiente para proveer información con alta performance, para ser aplicados, por ejemplo, a la síntesis de catalizadores y procesos catalíticos, al desarrollo de nuevos materiales y/o productos, además de suma utilidad para ser empleados en procesos específicos con numerosos parámetros de síntesis, ya que con las técnicas de diseño de experimentos se pueden tener en cuenta todas sus variables y sus interacciones. En este contexto, las metodologías basadas en superficie de respuesta juegan un papel fundamental en la estimación de condiciones de operación óptimas para la ejecución del experimento o en un proceso particular, ya que han mostrado ventajas respecto a otros métodos, por el hecho de tener medidas en términos de significancia estadística con la bondad de los modelos propuestos.

3. OBJETIVOS

El objetivo del presente curso es motivar y consolidar el interés de los estudiantes de Doctorado en Ingeniería, sobre los avances en el diseño de experimentos, así como difundir la aplicación de ésta metodología estadística en busca de la optimización de procesos y la generación de productos de alta complejidad; surgiendo así la importancia de aplicar la Metodología Diseño de Experimentos a procesos de interés científico-tecnológico.

4. CONTENIDOS

Introducción al Diseño de Experimentos: Principios básicos del diseño de experimentos. Etapas en el diseño de experimentos. Consideraciones prácticas sobre el uso de métodos estadísticos. Clasificación y selección de los diseños experimentales.

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

Definiciones Básicas: Población y muestra, parámetros y estadísticos. Distribuciones de probabilidad. Prueba e hipótesis. Planteamiento de una hipótesis estadística. Prueba para la media. Prueba para la varianza. Criterios de rechazo o aceptación equivalentes. Hipótesis para dos medias: comparación de dos tratamientos. Prueba para la igualdad de varianzas. Uso de un software estadístico

Experimentos de un solo factor (análisis de varianza): Diseño completamente al azar y ANOVA. Verificación de los supuestos de modelo. Elección del tamaño de la muestra.

Diseños de bloques: Diseño de bloques completos al azar

Diseños factoriales: Experimentación factorial vs. mover un factor a la vez. Tipos de diseños factoriales

Diseños superficie de respuesta: Método de máxima pendiente en ascenso. Diseños centrales compuestos. Diseños de Box-Behnken

Planeamiento de un experimento: Experimentación como estrategia para comprobar supuestos y generar aprendizaje. El diseño de experimentos y el ciclo de Deming. Etapas y actividades de la planeación y análisis de un experimento.

5. DURACIÓN

El curso tendrá una carga horaria de SESENTA (60) horas.

6. METODOLOGÍA

El régimen de cursado previsto es presencial. El cursado prevé la combinación de clases teóricas - expositivas y actividades prácticas.

7. EVALUACIÓN

Para la aprobación del curso se requerirá, además del 80% de asistencia, la ejecución de los

REGISTRADO
PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

trabajos prácticos, la elaboración y presentación de un diseño de experimentos grupal y la aprobación de un examen final individual.

II. CATÁLISIS AMBIENTAL

1. FUNDAMENTACIÓN

La protección ambiental contra la polución por emisiones de SOx, NOx y aromáticos, establece la necesidad de refinar las fracciones de petróleo antes de su uso en combustibles. El proceso de refinación involucra el hidrotratamiento 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, hidrodenitrogenación, hidrodesoxigenación, hidrodesaromatización y reacciones de ruptura catalítica. La creciente contaminación de los NOx 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 NOx. 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

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

en base a zeolitas intercambiadas, ZSM5, ZSM11, BEA, K y L resultaron activos para la SCR de NOx, siendo su forma protónica menos activa. Diferentes hidrocarburos parafínicos livianos, han sido empleados como gases reductores.

2. 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 catálisis ambiental, 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.

3. OBJETIVOS

Objetivo general:

Adquirir conocimientos sobre importantes procesos catalíticos orientados a la solución de la

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

problemática de la contaminación atmosférica.

Objetivos específicos:

- Concientizar acerca de la optimización de los procesos responsables de ciertas reacciones fundamentales a nivel mundial que puedan contribuir apreciablemente a la conservación del medio ambiente natural.
- Adquirir conocimientos esenciales sobre la formulación científica de un catalizador, realizada sobre las bases del conocimiento fisicoquímico 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.
- Adquirir una visión global de las técnicas de análisis precisas y de las metodologías de estudio de los procesos citados en el epígrafe anterior.

4. CONTENIDOS

Diseño de catalizadores: Preparación de catalizadores por: i) intercambio iónico en fase liquida o sólido-sólido; ii) técnica inversa de micelas, y postratamiento térmico o por extracción por solventes del vehículo empleado para tal fin; iii) encapsulando de los iones del metal por impregnación incipiente y sobre impregnación no-estequiométrica. Caracterización de catalizadores: XRD, BET, FTIR de piridina adsorbida, TEM, SEM-EDX, XPS y NMR-MAS. Medida de actividad. Optimización de catalizadores y rediseño en busca de sitios catalíticos requeridos en cada proceso.

REGISTRADO

PABLO A. HUEL

JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

Contaminación atmosférica: Agentes contaminantes. Transformación catalítica de monóxido de carbono en anhídrido carbónico. Lluvia ácida. 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. Reducción de las emisiones de compuestos orgánicos volátiles (COVs). Incineración de residuos sólidos urbanos. Hidrógeno: un vector energético no contaminante para automoción.

Fuentes estacionarias: *Procesos DeNOx*: Fábricas de ácido nítrico. Centrales térmicas. Procesos de desulfurización. Eliminación de compuestos orgánicos volátiles. Eliminación de NOx emitidos por fuentes fijas. 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 (CH_4, C_5H_{12}, C_2H_4, C_3H_3, etc.) como agentes reductores. Dilucidación del mecanismo de las reacciones ambientalmente factibles: a -NOx +O_2 + HC (Metano, Propano, Isobutano). b- NOx +O_2 + 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 y carbones mesoporosos tipo CMK. *Refinamiento de fracciones de petróleo*: Eliminación de azufre, nitrógeno y aromáticos mediante Hidrotratamiento Catalítico (HDT) de compuestos poliaromáticos. Eliminación de azufre mediante el proceso de Desulfurizacion oxidativa (ODS). Reacciones de oxidación de compuestos que contienen azufre como DBTs, tiofeno,

REGISTRADO

PABLO A. HUEL

JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

benzotiofenos. Tipos de agentes oxidantes, de solventes de extracción y catalizadores de oxidación. Reactores Batch.

Fuentes móviles: Automóviles con motor a gasolina. Motores Diesel. Tecnologías en desarrollo y nuevas tecnologías.

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

5. DURACIÓN

El curso tendrá una carga horaria de CIEN (100) horas.

6. METODOLOGÍA

El régimen de cursado previsto es presencial. El cursado prevé la combinación de clases teóricas - expositivas y actividades prácticas.

7. EVALUACIÓN

Para la aprobación del curso se requerirá, además del 80% de asistencia, la ejecución de los trabajos prácticos grupales y la aprobación de un examen final individual.

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

III. CINÉTICA QUÍMICA AVANZADA APLICADA A PROCESOS CATALÍTICOS HETEROGÉNEOS

1. FUNDAMENTACIÓN

Las reacciones químicas pueden ocurrir rápida o lentamente. Las explosiones del trinitrotolueno (TNT) ocurren en milisegundos mientras que el oxidar el 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 afectar los índices de esos pasos del mecanismo, pero se regeneran en otros pasos posteriores, pero afectando el índice de la reacción, se llaman 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.

2. JUSTIFICACIÓN

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.

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

3. OBJETIVOS

Objetivo general:

Brindar una base teórica y un conjunto de conceptos para comprender los fundamentos de las diferentes teorías de la velocidad de una reacción química, aprendiendo sobre la dinámica molecular de las reacciones químicas conociendo las reacciones complejas que se pueden experimentar.

Objetivos específicos:

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

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

4. CONTENIDOS

- Correlaciones empíricas. Modelos cinéticos formales.
- Energía aparente de activación. Energía de la reacción superficial. Calor de quimisorción.
- Modelos cinéticos en dos pasos. Mezclas reactantes. Usos y limitaciones. Compensación y falsa compensación. Modelo de Boudart. Análisis de curvas Vulcano.
- Modelos cinéticos para catalizadores ácidos. Empleo de la herramienta denominada αTest.
- Modelos cinéticos para catalizadores redox. Velocidad de oxidación. Velocidades de re-oxidación. Modelos de Mac Veen y Bremer.
- Modelo de regionalización de velocidades de formación de productos (en función de tipo y naturaleza de sitios activos) para reacciones unimoleculares (ERRA-1) y 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. Aplicación a reacciones de polimerización intra-poros de materiales nanoestructurados.
- 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 cinéticas y de adsorción. Estudio del efecto de competencia e inhibición entre reactantes y productos.
- Modelos Cinéticos aplicados a catálisis heterogénea. Procesos Industriales: Hidrotratamiento catalítico: Hidrodesulfurización (HDS) e Hidrodenitrogenación (HDN) de

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

gas oil. Determinación de las constantes cinéticas de la hidrodenitrogenación de quinolina, tetrahidroquinolina, 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 Langmuir-Hinshelwood, comparación con otros modelos cinéticos. Determinación de las constantes cinéticas y de adsorción. Estudio del efecto de competencia e inhibición.

- Modelos Cinéticos aplicados a catálisis heterogénea. Procesos Industriales: Desulfurización oxidativa (ODS). Determinación de las constantes cinéticas de la ODS de dibenzotiofeno y 4,6-dimetildibenzotiofeno utilizando catalizadores comerciales. Comparación con nuevos catalizadores para ODS desarrollados en el NANOTEC. Aplicación de distintos modelos cinéticos. Determinación de las constantes cinéticas y de la energía de activación.
- Modelado cinético de la síntesis de 2-metil, 1-4 naftoquinona (vitamina K3) y del diacetilo. 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.
- Evaluación de las constantes de velocidad en función del Turn Over Number y del Turn Over Frecuency. 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.
- 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

REGISTRADO
PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

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.

5. DURACIÓN

El curso tendrá una carga horaria de CIEN (100) horas.

6. METODOLOGÍA

El régimen de cursado previsto es presencial. El cursado prevé la combinación de clases teóricas - expositivas y actividades prácticas.

7. EVALUACIÓN

Para la aprobación del curso se requerirá, además del 80% de asistencia, la ejecución de los trabajos prácticos y la aprobación de un examen final individual.

IV. FÍSICO QUÍMICA DE NUEVOS MATERIALES NANOESTRUCTURADOS, NANOMATERIALES Y NANOTECNOLOGÍA

1. FUNDAMENTACIÓN

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 formadas por nanotubos, todos de la misma forma y tamaño. Las principales aplicaciones son: como sensores químicos, los que ya están bajo desarrollo. Ellas pueden

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

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 mas complicada es la utilización para dispositivos ópticos y eléctricos, tales como "alambres moleculares" (polímeros 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 del conocimiento de tal influencia sobre varias disciplinas ha tenido un enorme crecimiento en los últimos 4 años. Como consecuencia de esto, existe una gran deficiencia de profesionales e investigadores preparados en esta área, fundamentalmente en nuestro país y en 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. JUSTIFICACIÓN

Se pretende generar nuevos recursos humanos formados en conocimientos y desarrollos en la fisicoquímica de nuevos materiales nanoestructurados y nanotecnologías desde la

REGISTRADO
PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

perspectiva del campo en donde se realizan las investigaciones (escala Laboratorio) y hacia qué campo se pueden generar sus aplicaciones (con potencial transferencia de resultados) es decir desde la Nanociencia a la Nanotecnología, considerando la naturaleza de procesos prioritarios de aplicación.

3. OBJETIVOS

El objetivo del presente curso es la formación de recursos humanos en la preparación, caracterización, síntesis, propiedades electrónicas, magnéticas, ópticas y aplicación en catálisis, recubrimiento, almacenamiento de información, sensores biológicos, sensores ambientales, reservorios de H2, semiconductores orgánicos y separación de contaminantes ambientales empleando materiales nanoestruturados.

4. CONTENIDOS

Introducción: Impacto de la nanotecnología. Materiales microporosos y mesoporosos. Su manufactura. Nanoelectrónica y tecnología de computadoras. Medicina y salud. Exploración espacial. Energía y ambiente. Biotecnología y agricultura

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; temperatura y velocidad de calentamiento; presión; condiciones de la síntesis (como el orden de 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.

Mesoestructuras porosas nanoestructuradas: Características generales, diferencias entre

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

materiales micro y meso porosos. Diferenciación fisicoquímica. Fisicoquímica de la generación de orientadores espaciales de estructuras. Mecanismos de reacción sólido-sólido y liquido-sólido

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

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-15). 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. Tipos y características de los materiales de carbono poroso CMK. Preparación mediante la técnica del moldeo. 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 Polimerisation). CVD (Chemical Vapor Deposition). Materiales mesoporosos altamente ordenados. CMK- 3; CMK-1; CMK-15.

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.

REGISTRADO

PABLO A. HUEL

JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

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 27Al, 29Si, 13C). Interpretación de espectros XAFS (absorción de rayos X en estructura fina). Estudios de barrido calorimétrico diferencial, análisis térmicos diferenciales, y termodesorcion programada

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).

Fisicoquímica de composites MCM y SBA-huéspedes poliméricos: Fundamentos para la preparación de los compuestos. Avances tecnológicos. 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 fisicoquímicas de los materiales mixtos: Estabilidad química, determinación de temperatura de transición vítrea, determinación de conductividad, c.c. Desarrollo de nanoconductores de polianilina (PANI) o poliindol (PIND) y nuevos materiales compuestos (nanocomposites) de PANI-hospedaje o PIND-hospedaje. Síntesis de PANI y PIND dentro de los canales de los hospedajes de la familia de MCM y SBA. Caracterización de PANI y PIND contenida en aluminosilicatos mesoporosos. Naturaleza de la Interacción PANI-Reservorio PIND-hospedaje. 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

REGISTRADO

PABLO A. HUEL
JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

capacidad de almacenamiento de energía). Accesibilidad a la superficie (poros grandes). 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.

Fisicoquímica de composites MCM y SBA decorados con metales y huéspedes poliméricos: Desarrollo, síntesis y caracterización de composites nanoestructurados de polímeros conductores incluidos en silicatos o aluminosilicados modificados (decorados) con metales (tales como Ga, Ti, V). Modificaciones en la polimerización in-situ en la síntesis del polímero conductor por el agregado del metal. Variaciones de la conductividad eléctrica de estos materiales "hecha a medida" por el cambio en los sustituyentes de la cadena polimérica y sitios de anclaje posibles, como así también en la variación en los mecanismos de la polimerización in situ.

5. DURACIÓN

El curso tendrá una carga horaria de CIEN (100) horas.

6. METODOLOGÍA

El régimen de cursado previsto es presencial. El cursado prevé la combinación de clases teóricas - expositivas y actividades prácticas.

7. EVALUACIÓN

Para la aprobación del curso se requerirá, además del 80% de asistencia, la ejecución de los trabajos prácticos y la aprobación de un examen final individual.

R E G I S T R A D O

PABLO A. HUEL

JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

ORDENANZA Nº 1788

ANEXO II

CURSOS DE ACTUALIZACIÓN DE POSGRADO

DOCTORADO EN INGENIERÍA, MENCIÓN QUÍMICA

FACULTAD REGIONAL CÓRDOBA

Cuerpo Docente

I. AVANCES EN EL DISEÑO DE EXPERIMENTOS Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS

- Dr. Oscar ANUNZIATA (DNI 11.838.044) *Responsable*
- Dra. Jorgelina CUSSA (DNI 24.311.565)
- Dr. Marcos GÓMEZ COSTA (DNI 25.919.845

II. CATÁLISIS AMBIENTAL

- Dr. Oscar ANUNZIATA (DNI 11.838.044) *Responsable*
- Dra. Andrea BELTRAMONE (DNI 20.076.071)
- Dra. Verónica VALLES (DNI 30.900.381)
- Dra. Lorena RIVOIRA (DNI 28.959.679)

III. CINÉTICA QUÍMICA AVANZADA APLICADA A PROCESOS CATALÍTICOS HETEROGÉNEOS

- Dr. Oscar ANUNZIATA (DNI 11.838.044) *Responsable*
- Dra. Andrea BELTRAMONE (DNI 20.076.071)
- Dra. Brenda LEDESMA (DNI 29.355.487)
- Dra. Verónica VALLES (DNI 30.900.381)

R E G I S T R A D O

PABLO A. HUEL

JEFE DE DEPARTAMENTO - APOYO AL CONSEJO SUPERIOR

Ministerio de Educación
Universidad Tecnológica Nacional
Rectorado

IV. FÍSICO QUÍMICA DE NUEVOS MATERIALES NANOESTRUCTURADOS, NANOMATERIALES Y NANOTECNOLOGÍA

- Dr. Oscar ANUNZIATA (DNI 11.838.044) *Responsable*
- Dr. Marcos GÓMEZ COSTA (DNI 25.919.845)
- Dra. Juliana JUÁREZ (DNI 28.425.605)
- Dra. María Laura MARTÍNEZ (DNI 24.857.299)

Digitally signed by SOSA MIGUEL ANGEL
Date: 2020.11.06 09:39:47 -03:00
Reason: - Aprobación de documento.
Location: Rectorado UTN

Firmado digitalmente por UNIVERSIDAD TECNOLOGICA NACIONAL
Motivo: RECTOR: HECTOR EDUARDO AIASSA
Fecha y hora: 07.11.2020 20:43:14