

1. DENOMINACIÓN DEL CURSO

“Química Sostenible: Catálisis en sistemas homogéneos y heterogéneos. Teoría y aplicaciones hacia la sustentabilidad”

2. CATEGORÍA DEL CURSO (marcar lo que corresponda):

Curso de Doctorado

a. De Formación Específica (X)

b. De Formación General

Curso de Maestría

a. De Formación Específica (X)

b. De Formación General

Curso de Formación Superior

a. De Actualización

b. De Especialización (X)

c. De Profundización

3. CARACTERÍSTICAS DEL CURSO:

Teórico (X) Teórico-Práctico* (X)

*Indicar si se dictarán Seminarios o si se realizarán tareas prácticas:

Se dictará un seminario integrador de los temas desarrollados, donde se discutirán trabajos bibliográficos actuales.

Se plantearán ejercicios de diseño de sistemas catalíticos adecuados a determinadas aplicaciones, y discusiones críticas sobre catalizadores ya publicados en literatura.

4. DIRECTORES:

Apellido y Nombres: **Domine, Marcelo Eduardo** (Se adjunta Curriculum Vitae)

Grado o Título: Doctor en Química

Cargo: Científico Titular del CSIC

Institución: Instituto de Tecnología Química, ITQ, UPV-CSIC, Valencia, España

Apellido y Nombres: **Rossi, Laura Isabel**

Grado o Título: Doctora en Ciencias Químicas

Cargo: Profesora Asociada (DS). Investigadora Independiente CONICET

Institución: INFIQC, Dpto. Química Orgánica, Fac. Cs. Químicas, UNC

5. COORDINADORES:

Apellido y Nombres: **Fernández, Mariana Adela**

Grado o Título: Doctora en Ciencias Químicas

Cargo: Profesora Asociada (DE). Investigadora Independiente CONICET

Institución: INFIQC, Dpto. Química Orgánica, Fac. Cs. Químicas, UNC

Apellido y Nombre: **Granados, Alejandro Manuel**

Grado o Título: Doctor en Ciencias Químicas

Cargo: Profesor Asociado (DE). Investigador Independiente CONICET
Institución: INFIQC, Dpto. Química Orgánica, Fac. Cs. Químicas, UNC

6. DOCENTES

Apellido y Nombres: **Beltramone, Andrea.**
Grado o Título: Doctora en Ingeniería Química
Cargo: Profesora Asociada (DE). Investigadora Independiente CONICET
Institución: NANOTEC, Fac. Reg. Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional

Apellido y Nombres: **Vico, Raquel.**
Grado o Título: Doctora en Ciencias Químicas
Cargo: Profesora Adjunta (DS). Investigadora Independiente CONICET
Institución: INFIQC, Dpto. Química Orgánica, Fac. Cs. Químicas, UNC

Apellido y Nombres: **Martínez, María Laura.**
Grado o Título: Doctora en Ingeniería Química
Cargo: Profesora Asistente (DE). Investigadora Independiente CONICET
Institución: NANOTEC, Fac. Reg. Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional

Apellido y Nombres: **Fracaroli, Alejandro Matías.**
Grado o Título: Doctor en Ciencias Químicas
Cargo: Profesora Asistente (DS). Investigador Adjunto CONICET
Institución: INFIQC, Dpto. Química Orgánica, Fac. Cs. Químicas, UNC

Apellido y Nombres: **Silva, Oscar Fernando.**
Grado o Título: Doctor en Ciencias Químicas
Cargo: Profesor Asistente (DS). Investigador Adjunto CONICET
Institución: INFIQC, Dpto. Química Orgánica, Fac. Cs. Químicas, UNC

7. PROGRAMA A DESARROLLAR (adjuntar en hoja aparte incluyendo los siguientes datos):

I Objetivos (orientar hacia quiénes va dirigido el curso)

II Contenidos teóricos y de seminarios y prácticos si los hubiere.

III Metodología de evaluación:

Obligatoria (X) Optativa Sin evaluación

IV Bibliografía general y específica:

8. CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

Fecha de iniciación: 21 de noviembre

Fecha de finalización: 24 de noviembre

Fecha límite de inscripción: 30 de octubre

Nº total de horas: 25 horas

Nº total de horas teóricas: 20 horas

Nº total de horas teórico-prácticas (seminario): 5 horas

Nº de alumnos que se estima asistirán al curso: 20 alumnos

Nº mínimo de alumnos para dictar el curso: 10 alumnos

Nº máximo de alumnos admitidos: 30 alumnos

Arancel: Los aranceles incluyen certificado.

\$ 10.000.- Alumnos de postgrado de la UNC sin cargo docente o de otras Universidades Nacionales

\$ 12.500.- Alumnos de instituciones educativas privadas / empresas / industrias.

\$ 15.000.- Profesionales.

USD 100.- Alumnos extranjeros.

Tanto los doctorandos de FCQ-UNC sin cargo docente como los doctorandos de la UNC con cargos docentes de la UNC no pagan arancel.

9. Indicar característica de interés del curso o que se juzgue de importancia para su aprobación y/o divulgación:

La Química Sustentable ("Sustainable or Green Chemistry) tuvo su inicio a finales de la década de los noventa, y surge ante la necesidad de ver a las Ciencias Químicas no sólo como un área de investigación y desarrollo que provee nuevas sustancias que permiten una mejor calidad de vida, sino también como fuente de contaminantes potencialmente peligrosos que van en detrimento de la misma. El concepto de sustentabilidad se ha intensificado en los últimos años mediante la posibilidad de producir combustibles y productos químicos a partir de materias primas renovables, reduciendo así la dependencia de los recursos fósiles, las emisiones de gases de efecto invernadero y la huella o impacto de carbono de los procesos y productos, caminando hacia una economía y/o desarrollo más sostenible para la sociedad.

En este curso se pretende transmitir a los estudiantes que en química, como en muchos otros aspectos de la vida, el fin no justifica los medios. Se pueden generar nuevos compuestos químicos con un impacto ambiental mínimo si se consideran todas las variables, siendo esto aplicable desde los laboratorios de enseñanza, pasando por los de investigación y desarrollo hasta llegar a la industria. No quedan fuera de esta presentación la evaluación y análisis de procesos industriales en vigencia que podrían ser modificados para disminuir el riesgo, toxicidad, generación de residuos, consumo de energía, etc. de un proceso determinado para buscar alternativas más amigables con el ambiente y con el hombre mismo.

Se hará especial hincapié en el estudio de distintos sistemas catalíticos, homogéneos, microheterogéneos, micelares, heterogéneos, etc. y su aporte al desarrollo de nuevos procesos químicos más sostenibles y de gran interés para la industria. Se abordarán conceptos más generales y de gran actualidad, por ejemplo, procesos de biorrefinería, biorrefinerías integradas, bioeconomía, economía circular, criterios de evaluación en sostenibilidad y análisis de ciclo de vida de un producto y/o proceso..

PROGRAMA A DESARROLLAR:

Objetivos: Aprender los principios y fundamentos de la Química Verde o Sustentable. Conocer los distintos parámetros que permiten cuantificar los procesos utilizados y aquellos que permitan estimar la incidencia de procesos no puestos en marcha aún. Comprender el rol básico de la catálisis dentro de este marco y su importancia en la reducción de residuos y la mejora de la eficiencia de los procesos. Adquirir una visión global de los principales tipos de catalizadores homogéneos, heterogéneos y los distintos tipos de reacciones catalizadas. Conocer los alcances y limitaciones de nuevos sistemas catalíticos tales como los sistemas micelares y entramados metal-

orgánicos, MOFs, etc. como alternativas válidas para alcanzar las metas de sustentabilidad. Conocer algunos catalizadores y procesos catalíticos actualmente utilizados en la industria petroquímica y en química fina. Conocer los procesos catalíticos actuales y en desarrollo para el aprovechamiento de materias primas renovables, en particular, la biomasa lignocelulósica y sus derivados, y su nivel de competitividad con los procesos ya instalados en la industria del petróleo. Adquirir los criterios básicos para la evaluación de la sostenibilidad de un proceso, considerando los principios de la Química Verde y Sostenible, que ayuden a seleccionar y/o desarrollar un sistema o proceso catalítico determinado.

Programa:

1- Química Verde y Desarrollo Sostenible

Fundamentos de la química sustentable y de la sostenibilidad. Los principios de la Química Verde. Selección de reactivos, disolventes y oxidantes y/o reductores. El uso de catalizadores. El ahorro de energía y de átomos. La Química Verde en el laboratorio y la industria. Parámetros que indican la sustentabilidad de un proceso. La reducción de efluentes y residuos. El respeto al medio ambiente y el uso de recursos renovables. Procesos industriales convencionales y procesos basados en una química verde. Avances hacia un desarrollo sostenible. Situación actual y perspectivas de futuro.

Total de Horas: 2h

Docente/s: Domine – Rossi

2- Catálisis Homogénea y Química Verde

El papel de la catálisis homogénea en la Química Verde. Catálisis ácido base de Bronsted como modelo de catálisis homogénea. Catalizadores homogéneos de uso generalizado en la industria y el laboratorio, ejemplos. Metales de transición y ligandos: Propiedades y actividad catalítica. Procesos y reacciones catalíticas homogéneas.

Inmovilización de catalizadores homogéneos. Nanocatalizadores coloidales, modelo de Langmuir–Hinshelwood, isothermas de adsorción sobre superficies en equilibrio de Freundlich.

Total de Horas: 4h

Docente/s: Granados – Vico

3- Sistemas microheterogéneos como catalizadores.

Introducción a los sistemas micelares y agregados relacionados. Solubilización de compuestos orgánicos hidrofóbicos en agua. Surfactantes derivados de fuentes renovables. Reactividad en medios confinados y el uso de agua como solvente. Aplicaciones de la catálisis micelar a la síntesis de compuestos orgánicos de interés industrial y comercial. Empleo de metalosurfactantes para catálisis.

Total de Horas: 3

Docente/s: Fernández – Silva

4- Catálisis Heterogénea: Reactores y Procesos Catalíticos Heterogéneos

a- El rol de la catálisis heterogénea en la Química Verde. Ventajas de un catalizador heterogéneo y efectos de su aplicación en química. Conceptos básicos: conversión, selectividad, eficiencia catalítica (i.e. TON, TOF). Catalizadores heterogéneos de uso generalizado en la industria y el

laboratorio (Ejemplos de aplicación). Los reactores catalíticos (Conceptos básicos y generalidades). Disposición del catalizador. Reactores de flujo continuo (i.e. lecho fijo, lecho fluidizado), semi-continuo y discontinuo (reactores batch). Ejemplos de reactores catalíticos industriales.

b- Aplicación de catalizadores sólidos en procesos de química fina, petroquímica y refino (Ejemplos). Sólidos ácidos (acidez de Brønsted y/o Lewis) como catalizadores en distintas reacciones de interés. Sólidos básicos como catalizadores en reacciones de: i) condensación, ii) transesterificación. Catalizadores heterogéneos redox. Procesos de reducción y de oxidación catalítica selectiva (Ejemplos). Propiedades de adsorción (hidrofobia/hidrofilia), su determinación, control y efectos en la actividad catalítica. Catalizadores bi-funcionales y multi-funcionales (Ejemplos de aplicación). Procesos catalíticos multi-etapas en un solo paso (“one-pot”) y reacciones catalíticas en cascada (Ejemplos de aplicación).

Total de Horas: 3 (1,5 h para cada ítem)

Docente/s: Andrea Beltramone - Marcelo E. Domine

5- Diseño de Catalizadores Heterogéneos

a- Síntesis de materiales catalíticos sólidos (Conceptos básicos y generalidades). Materiales sólidos amorfos, laminares y porosos. Óxidos y óxidos mixtos de metales de transición, óxidos laminares dobles (i.e. hidrotalcitas), y otros. Tamices moleculares micro-, meso-, y macroporosos. Zeolitas, zeolitas deslaminadas y zeotipos. La incorporación de sitios activos (Metales nobles y metales de transición) con nuevas propiedades catalíticas. Diseño racional de catalizadores heterogéneos. Catalizadores sólidos nano-estructurados y con porosidad controlada. Catalizadores ácido/base y catalizadores redox (Ejemplos). Catalizadores basados en nano-partículas metálicas y óxidos metálicos nano-particulados.

b- Materiales mesoporosos y mesoporosos ordenados basados en sílice, aluminosilicatos y también materiales carbonosos. Distintas metodologías síntesis y preparación. Ejemplos de aplicación.

c- Materiales híbridos orgánico-inorgánicos (i.e. POM's, MOF's). Metales y complejos organometálicos soportados y encapsulados en sólidos amorfos y porosos, entre otros.

Total de Horas: 4,5h (1,5 h para cada ítem)

Docente/s: Marcelo E. Domine - María Laura Martínez - Alejandro M. Fracaroli

6- Catalizadores Heterogéneos para la Transformación de la Biomasa

a- Los recursos naturales y la biomasa (Conceptos básicos). Tipos de biomasa (Generalidades). La biomasa de tipo ligno-celulósica (Componentes y propiedades). Procesos de transformación directa de la biomasa (fermentación, gasificación, pirólisis, combustión). Obtención de energía, combustibles, y productos químicos a partir de la biomasa. Aplicación de catalizadores heterogéneos en procesos de: a) producción de gas de síntesis (“*syn-gas*”) y procesos posteriores (i.e. Fischer-Trop), b) producción de Hidrógeno, c) producción de bio-líquidos, d) aprovechamiento de los bio-líquidos, e) aprovechamiento de azúcares y derivados, f) obtención de productos de uso en química básica e intermedios (“*platform chemicals*”), g) aprovechamiento de los “*platform chemicals*” y otros compuestos derivados de la biomasa. Desarrollo de nuevos procesos catalíticos para la valorización de la biomasa.

b- Los conceptos de biorrefinería, biorrefinerías integradas, la bioeconomía, la economía circular, los criterios de evaluación en sostenibilidad y el análisis de ciclo de vida de un producto y/o proceso. Conclusiones generales.

Total de Horas: 3,5

Docente/s: Marcelo E. Domine

7- Seminario General: Evaluación de la Sostenibilidad de un Proceso (Caso Práctico)

Consideración de criterios básicos de sostenibilidad en procesos mediante el uso de herramientas de evaluación como por ejemplo Ecoscale y Ciclo de vida. Ejemplos y casos prácticos para trabajo en grupos.

Total de Horas: 5

Docente/s: Todos los docentes

Bibliografía:

1. P. T. Anastas, J.C. Warner (Eds.), *"Green Chemistry: Theory and Practice"*, Oxford Univ. Press, NY, **1998**.
2. P.T. Anastas, I.J. Levy, K.E. Parent (Eds.), *"Green Chemistry Education, Changing the Course of Chemistry"* ACS SYMPOSIUM SERIES 1011. **2009**.
3. A.P. Dicks, A. Hent. *"Green Chemistry Metrics. A Guide to Determining and Evaluating Process Greenness"*, Springer, **2015**. Ed. S.K. Sharma.
4. P. W.N.M. van Leeuwen, *Homogeneous Catalysis, Understanding the Art*. **2004**.
5. R.A. Sheldon, I. Arends, U. Hanefeld (Eds.), *"Green Chemistry and Catalysis"*, Wiley-VCH, Weinheim, **2007**.
6. P. Tundo, A. Perosa, F. Zecchini, (Eds.), *"Methods and Reagents for Green Chemistry"*. Wiley **2007**.
8. T. Lorenzetto, F. Fabris, A. Scarso, *Curr. Opinion Colloid Interface Sci.* **2023**, 64, 101689.
9. S. Mattiello, E. Ghiglietti, A. Zucchi, L. Beverina, *Curr. Opinion Colloid Interf. Sci.* **2023**, 64, 101681.
10. L. Zhang, S. Yin, W. Guan, C. Lu, *Adv. Optical Mater.* **2023**, 11, 2202705.
11. L. Chen, S. Zhang, X. Liu, X. Ge, *Curr. Opinion Colloid Interf. Sci.* **2023**, 65, 101691.
12. J. Hagens (Ed.), *"Industrial Catalysis"*, Wiley-VCH, Weinheim, **2006**.
13. F. Bartholomeu, P. Farrauto (Eds.), *"Fundamentals of Industrial Catalytic Processes"*, AIChE, Wiley-Interscience, Weinheim, **2006**.
14. *"Introduction to Reticular Chemistry: Metal-Organic Frameworks and Covalent Organic Frameworks"*. O. M. Yaghi, M. J. Kalmutzki, C. S. Diercks, Wiley-VCH, Weinheim, **2019**. 509 pp.
15. *"Nanostructured Multifunctional Materials, Chapter 5: Metal-Organic Frameworks (MOFs), Multi Functionality within Order"*, Alejandro M. Fracaroli, Editor Esteban Franceschini CRC Press Taylor Francis Group **2021**.
16. C. Gropp, S. Canossa, S. Wuttke, F. Gándara, Q. Li, L. Gagliardi, O. M. Yaghi, *ACS Cent. Sci.*, **2020**, 6, 1255.
17. C. A. Trickett, T. M. Osborn Popp, J. Su, C. Yan, J. Weisberg, A. Huq, P. Urban, J. Jiang, M. J. Kalmutzki, Q. Liu, J. Baek, M. P. Head-Gordon, G. A. Somorjai, J. A. Reimer, O. M. Yaghi, *Nature Chem.*, **2019**, 11, 170.
18. C. S. Diercks, S. Lin, N. Kornienko, E. A. Kapustin, E. M. Nichols, C. Zhu, Y. Zhao, C. J. Chang, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, 140, 1116.
19. A. M. Fracaroli, P. Siman, D. Nagib, M. Suzuki, H. Furukawa, F. D. Toste, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, 138, 8352.
20. J. Yuan, A. M. Fracaroli, W. G. Klemperer, *Organometallics*, **2016**, 35, 2149.
21. S. Mattiello, E. Ghiglietti, A. Zucchi, L. Beverina, *Curr. Op. Coll. Interface Sci.* **2023**, 64, 101681.
22. L. Zhang, S. Yin, W. Guan, C. Lu, *Adv. Optical Mater.* **2023**, 11, 2202705.
23. T. Lorenzetto, F. Fabris, A. Scarso, *Curr. Op. Coll. Interface Sci.* **2023**, 64, 101689.
24. L. Chen, S. Zhang, X. Liu, X. Ge, *Curr. Op. Coll. Interface Sci.* **2023**, 65, 101691.
25. E. V. Anslyn, D. A. Dougherty. *Modern Physical Organic Chemistry, University Science Books*, **2006**.

26. Y. Liu, J. Liu, Z. Xing , X. Zhang, C. Luo,, W. Yan, X. Jin, *Catalysts* **2023**, 13, 23.

27. T. K. Das, N. Ch. Das. *International Nano Letters* **2022**, 12, 223.

Cronograma de Actividades

	Día 1	Día 2	Día 3	Día 4
Mañana (9:00-12:15) Con un receso de 15min	Tema 1 y 2 (3 h)	Tema 3 (3 h)	Temas 5a y 5b (3 h)	Tema 6b y Seminario Gral. (3 h)
Tarde (14:00-17:15) Con un receso de 15min	Tema 2 (3 h)	Temas 4a y 4b (3 h)	Temas 5c y 6a (3 h)	Seminario Gral. (4 h)
Total (h)	6	6	6	7
Total Gral.	25 horas			

Metodología Docente: Exposiciones teóricas y seminario de discusión.

Criterios de Evaluación: Prueba escrita al final del período docente en la que se valorarán las nociones elementales y el criterio práctico adquiridos al analizar un proceso catalítico desde todos los aspectos vistos en el curso.