

Fundamentos de Catálisis Heterogénea

Unidad 1: INTRODUCCIÓN A LA CATÁLISIS HETEROGÉNEA

Dra. Laura Díaz Rodríguez
Dr. Douglas Jimmy Escalante Ayala
Dra. Karina Elvira Rodríguez Espinoza

Estructura

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.1. Definición y comparación con catálisis homogénea.

1.1.2. Aspectos clave que diferencian ambos tipos.

1.1.3. Mecanismo Típico de la Catálisis Heterogénea.

1.2. Aplicaciones Industriales Clave de la Catálisis Heterogénea.

1.2.1. Refino del petróleo.

1.2.2. Síntesis de amoníaco (Proceso Haber-Bosch)

1.2.3. Catálisis ambiental

1.2.4. Producción de productos químicos básicos.

Estructura

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea.

1.3.1. Refino de Petróleo.

1.3.2. Síntesis de Amoníaco (Proceso Haber-Bosch).

1.3.3. Catálisis Ambiental.

1.3.4. Otras Aplicaciones Relevantes.

1.1. Catálisis Heterogénea.

- ❖ La catálisis heterogénea es una de las ramas más importantes dentro del estudio de la catálisis y constituye el pilar fundamental de muchos procesos químicos industriales y medioambientales.
- ❖ Su nombre proviene del hecho de que el catalizador se encuentra en una fase distinta a la de los reactivos. Generalmente, el catalizador es un sólido, mientras que los reactivos están en fase gaseosa o líquida.
- ❖ Este tipo de catálisis desempeña un papel crucial en la transformación de materias primas en productos de alto valor añadido, como combustibles, plásticos, fertilizantes y productos farmacéuticos.

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.1. Definición y comparación con catálisis homogénea.

- ❖ La **catálisis heterogénea** se refiere a los procesos catalíticos en los que el *catalizador está en una fase distinta a la de los reactivos*. Generalmente, el catalizador es un sólido, mientras que los reactivos son **gases o líquidos**. Esta separación física permite que las reacciones ocurran en la superficie del catalizador, donde los reactivos se adsorben, reaccionan y luego se desorben como productos.
- ❖ Una característica clave de la catálisis heterogénea es que permite una *fácil separación del catalizador del medio de reacción*, lo que facilita su *recuperación y reutilización*. Esto la hace especialmente atractiva para procesos a gran escala, como los industriales, donde la eficiencia operativa y económica es prioritaria.

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.1. Definición y comparación con catálisis homogénea.

- ❖ Además, desde un punto de vista de diseño, los catalizadores heterogéneos pueden ser *estructurados, soportados o modificados superficialmente*, lo que permite adaptar su actividad, selectividad y estabilidad en función del proceso deseado. En cambio, en la catálisis homogénea, las modificaciones deben hacerse directamente en la estructura molecular del catalizador, generalmente mediante síntesis química más compleja.
- ❖ Este tipo de catálisis es ampliamente utilizado en la industria debido a su facilidad de recuperación del catalizador, su estabilidad térmica y su capacidad para operar en condiciones extremas de presión y temperatura.
- ❖ Este tipo de catálisis es esencial en la industria moderna, ya que permite llevar a cabo procesos químicos de manera más eficiente, económica y sostenible. Su uso se extiende desde la producción de combustibles y fertilizantes hasta la purificación del aire y el tratamiento de aguas residuales.



1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.1. Definición y comparación con catálisis homogénea.

- ❖ Una de las principales ventajas de la catálisis heterogénea es la facilidad de separación del catalizador del medio de reacción, lo que permite su reutilización y reduce los costos operativos. Además, los catalizadores heterogéneos suelen ser más estables frente a condiciones extremas de temperatura y presión, lo que los hace ideales para procesos industriales a gran escala.
- ❖ En contraste, la catálisis homogénea implica que el catalizador y los reactivos están en la misma fase, usualmente en solución líquida. Esto permite una interacción molecular más íntima, lo que puede traducirse en una mayor selectividad y eficiencia en ciertas reacciones químicas.
- ❖ Sin embargo, esta ventaja viene acompañada de desafíos importantes. Por ejemplo, la separación del catalizador del medio de reacción es más complicada, lo que puede dificultar su reutilización y aumentar los costos operativos. Además, los catalizadores homogéneos suelen ser más sensibles a impurezas y condiciones del entorno.

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.2. Aspectos clave que diferencian ambos tipos.

- ❖ **Accesibilidad y reutilización:** En catálisis heterogénea, el catalizador puede recuperarse fácilmente mediante filtración o decantación, lo que lo hace ideal para procesos continuos. En la catálisis homogénea, se requieren técnicas más sofisticadas para separar el catalizador del producto final.
- ❖ **Control de la reacción:** La catálisis homogénea permite un control más preciso sobre la química de la reacción, lo que es útil en síntesis orgánica fina. En cambio, la catálisis heterogénea es más robusta y adecuada para procesos a gran escala..
- ❖ **Diseño del catalizador:** En catálisis heterogénea, el diseño de la superficie del catalizador (porosidad, área superficial, sitios activos) es crucial. En la homogénea, el diseño se enfoca más en la estructura molecular del catalizador y su interacción con los reactivos.

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.3. Mecanismo Típico de la Catálisis Heterogénea.

La catálisis heterogénea ocurre principalmente en la superficie del catalizador, donde los reactivos interactúan con sitios activos específicos para transformarse en productos. El proceso general se puede descomponer en seis etapas secuenciales:

1. Difusión externa

Antes de que ocurra cualquier reacción química, las moléculas de los reactivos deben *migrar desde el volumen de la mezcla reaccionante hasta la superficie del catalizador*. Este proceso depende de factores como el flujo del fluido, la agitación y las propiedades físicas del medio. Si la transferencia de masa es lenta, puede limitar la velocidad de reacción, incluso si el catalizador es muy activo.

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.3. Mecanismo Típico de la Catálisis Heterogénea.

2. Adsorción de reactivos

Una vez que los reactivos alcanzan la superficie, se produce su *adsorción*.

Este paso consiste en la *fijación física o química* de las moléculas sobre los *sitios activos del catalizador*.

- En la adsorción física (fisisorción), las moléculas se adhieren débilmente mediante fuerzas de Van der Waals.
- En la adsorción química (quimisorción), se forman enlaces químicos entre el reactivo y el catalizador, siendo este tipo de adsorción la que generalmente da lugar a la reacción.

La adsorción es selectiva: solo ciertas especies pueden interactuar eficazmente con los sitios activos disponibles.

Ejemplo: El hidrógeno molecular (H_2) se disocia en átomos al adsorberse sobre un catalizador de níquel.



1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.3. Mecanismo Típico de la Catálisis Heterogénea.

3. Activación de los reactivos

Una vez adsorbidos, los reactivos se *activan* gracias a la interacción con los sitios activos del catalizador. Esto puede implicar:

- Ruptura de enlaces.
- Formación de especies intermedias reactivas.

Ejemplo: En la hidrogenación de alquenos, el doble enlace del alqueno se activa al interactuar con la superficie metálica.

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.3. Mecanismo Típico de la Catálisis Heterogénea.

4. Reacción superficial

Una vez adsorbidos, los reactivos pueden *reorganizarse, disociarse o reaccionar entre sí* en la superficie del catalizador. Esta etapa es donde tiene lugar la transformación química propiamente dicha, mediada por los sitios activos que facilitan la ruptura y formación de enlaces.

En algunos casos, los productos se forman directamente sobre la superficie; en otros, se forman intermedios superficiales que luego evolucionan hacia productos finales.

Ejemplo: En la síntesis de amoníaco, los átomos de N y H reaccionan sobre el hierro para formar NH_3 .

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.3. Mecanismo Típico de la Catálisis Heterogénea.

5. Desorción de productos

Tras la reacción, los productos formados deben desprenderse de la superficie del catalizador para liberar los sitios activos y permitir que nuevas moléculas de reactivo sean adsorbidas. Este paso, denominado *desorción*, es esencial para mantener la actividad continua del catalizador.

Una desorción lenta puede llevar a la *saturación de la superficie* y, por tanto, a una disminución de la velocidad de reacción.

Ejemplo: En la síntesis de amoníaco, los átomos de N y H reaccionan sobre el hierro para formar NH₃.

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.3. Mecanismo Típico de la Catálisis Heterogénea.

6. Difusión interna / externa de los productos

Finalmente, los productos desorbidos deben *difundir fuera de la superficie del catalizador* y regresar al medio de reacción. Si el catalizador es poroso, puede haber también una etapa de *difusión interna*, donde los productos migran desde los poros hasta la superficie exterior.

1.1. Catálisis Heterogénea.

1.1.3. Mecanismo Típico de la Catálisis Heterogénea.

Resumen del Mecanismo de Catálisis Heterogénea

1. Difusión de los reactivos hacia el catalizador.
2. Adsorción de los reactivos en la superficie activa.
3. Activación de los reactivos.
4. Reacción química sobre la superficie.
5. Desorción de los productos.
6. Difusión de los productos hacia el exterior.

1.2. Aplicaciones Industriales Clave de la Catálisis Heterogénea.

- ❖ La catálisis heterogénea es esencial en numerosos procesos industriales debido a su eficiencia, estabilidad y facilidad de recuperación del catalizador. A continuación, se describen algunas de sus aplicaciones más importantes:.

1.2. Aplicaciones Industriales Clave de la Catálisis Heterogénea.

1.2.1. Refino del petróleo.

Uno de los usos más extendidos de la catálisis heterogénea es en la industria del petróleo. Aquí, los catalizadores sólidos permiten transformar fracciones pesadas del crudo en productos más ligeros y valiosos como gasolina, diésel y queroseno.

- ❖ **Craqueo catalítico fluido (FCC):** Utiliza zeolitas como catalizadores para romper largas cadenas de hidrocarburos en moléculas más pequeñas, como gasolina y propileno.
- ❖ **Hidrodesulfuración (HDS):** Emplea catalizadores metálicos cobalto-molibdeno o níquel-molibdeno sobre alúmina para eliminar el azufre de los combustibles, reduciendo la contaminación ambiental producida por la emisión de dióxido de azufre (SO_2).
- ❖ **Reformado catalítico:** Convierte naftas en compuestos aromáticos de alto octanaje, mejorando la calidad de la gasolina.



1.2. Aplicaciones Industriales Clave de la Catálisis Heterogénea.

1.2.2. Síntesis de amoníaco (Proceso Haber-Bosch).

Este proceso es fundamental para la producción de fertilizantes nitrogenados. Consiste en la reacción de nitrógeno (N_2) e hidrógeno (H_2) sobre un catalizador de hierro sólido a altas presiones y temperaturas.

- ❖ El catalizador heterogéneo permite que esta reacción, que es termodinámicamente desfavorable en condiciones normales, ocurra de forma eficiente a escala industrial.
- ❖ La producción de amoníaco es crítica para la seguridad alimentaria global, ya que permite la fabricación de fertilizantes que aumentan el rendimiento agrícola.
- ❖ **Ejemplo:** Catalizador de hierro con promotores de potasio y aluminio. Se utiliza a temperaturas de 400-500 °C y presiones de 150-300 atm. El amoníaco producido se usa para fabricar fertilizantes como el nitrato de amonio.

1.2. Aplicaciones Industriales Clave de la Catálisis Heterogénea.

1.2.3. Catálisis ambiental.

La catálisis heterogénea también desempeña un papel crucial en la protección del medio ambiente:

- ❖ **Convertidores catalíticos en automóviles:** Utilizan catalizadores de metales nobles (platino, paladio, rodio) para transformar gases tóxicos como monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrógeno (NOx) e hidrocarburos no quemados en compuestos menos dañinos como dióxido de carbono (CO₂), nitrógeno (N₂) y vapor de agua (H₂O).
- ❖ **Eliminación de compuestos orgánicos volátiles (COVs):** En la industria química, se emplean catalizadores sólidos para oxidar estos contaminantes a CO₂ y H₂O.
- ❖ **Reducción catalítica selectiva (SCR):** Utilizada en plantas industriales y vehículos diésel para reducir emisiones de NOx mediante el uso de amoníaco o urea como agente reductor.



1.2. Aplicaciones Industriales Clave de la Catálisis Heterogénea.

1.2.4. Producción de productos químicos básicos.

Muchos productos químicos esenciales se obtienen mediante catálisis heterogénea:

- ❖ **Producción de ácido nítrico, ácido sulfúrico y metanol.** En la producción de metanol Se emplea un catalizador de $\text{Cu}/\text{ZnO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ para sintetizar metanol a partir de CO , CO_2 e H_2 .
- ❖ **Hidrogenación de aceites vegetales** para producir margarinas y grasas sólidas. Se usa níquel como catalizador para convertir aceites líquidos en grasas sólidas, como en la producción de margarina.
- ❖ **Síntesis de polímeros** como polietileno y polipropileno. Se utilizan catalizadores de Ziegler-Natta (como TiCl_4 sobre MgCl_2) para producir polietileno, un plástico ampliamente usado.



1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

- ❖ La **catálisis heterogénea** juega un papel central en numerosos procesos industriales, energéticos y medioambientales. Su versatilidad, durabilidad y facilidad de separación del catalizador la han convertido en una herramienta esencial para la producción a gran escala de compuestos químicos. A continuación, se describen las principales áreas de aplicación:

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.1. Refino de Petróleo.

La industria del petróleo es uno de los sectores que más depende de la catálisis heterogénea. En el refino, se emplean catalizadores sólidos para transformar crudos pesados en productos más ligeros y valiosos, como gasolinas, diésel, queroseno y gases licuados. Algunos procesos clave incluyen:

- ❖ **Craqueo catalítico fluido (FCC):** rompe moléculas grandes en hidrocarburos más ligeros usando zeolitas como catalizadores.
 - **Catalizador:** Zeolitas tipo Y (USY) soportadas en matriz de sílice-alúmina.
 - **Condiciones típicas:**
 - Temperatura: 480-550 °C
 - Presión: 1-3 atm
 - Tiempo de contacto corto (segundos)

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.1. Refino de Petróleo.

- ❖ **Hidrotratamiento:** elimina impurezas como azufre, nitrógeno y metales pesados mediante reacciones con hidrógeno en presencia de catalizadores metálicos soportados (por ejemplo, Co-Mo o Ni-Mo sobre alúmina).
 - **Catalizador:** Sulfuros de cobalto-molibdeno (CoMo) o níquel-molibdeno (NiMo) soportados sobre alúmina (Al_2O_3).
 - **Condiciones típicas:**
 - Temperatura: 300-400 °C
 - Presión: 30-130 atm
 - Gas reductor: Hidrógeno (H_2)

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.1. Refino de Petróleo.

- ❖ **Reformado catalítico:** convierte naftas en productos de alto octanaje usando catalizadores de platino.
 - **Catalizador:** Platino (Pt) soportado en alúmina, a veces con renio (Re) como promotor.
 - **Condiciones típicas:**
 - Temperatura: 450–520 °C
 - Presión: 5–35 atm
 - Atmósfera: Hidrógeno

Estos procesos permiten optimizar la calidad del combustible y cumplir con regulaciones medioambientales.

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.2. Síntesis de Amoníaco (Proceso Haber-Bosch).

El amoníaco (NH_3) es un compuesto fundamental para la producción de fertilizantes nitrogenados, y su síntesis representa una de las reacciones más significativas en la historia de la química industrial. Se lleva a cabo mediante la reacción de nitrógeno e hidrógeno en presencia de un catalizador sólido, generalmente hierro (Fe) con promotores como óxidos de aluminio y potasio.



Este proceso es altamente eficiente gracias al diseño del catalizador y a condiciones optimizadas de presión y temperatura. La reacción es reversible y exotérmica, por lo que requiere un equilibrio entre cinética y termodinámica.

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.2. Síntesis de Amoníaco (Proceso Haber-Bosch).

- Catalizador: Hierro metálico (Fe) activado con promotores como óxidos de potasio (K_2O), calcio (CaO), y alúmina (Al_2O_3).
- Condiciones típicas:
 - Temperatura: 400–500 °C
 - Presión: 100–300 atm
 - Relación molar $H_2:N_2 \approx 3:1$

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.3. Catálisis Ambiental.

La catálisis heterogénea también es fundamental en tecnologías de protección ambiental, donde ayuda a reducir emisiones contaminantes y a tratar residuos químicos. Algunas aplicaciones clave son:

- ❖ **Conversores catalíticos en automóviles:** reducen las emisiones de monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrógeno (NO_x) e hidrocarburos no quemados (HC) mediante catalizadores de metales nobles como platino (Pt), paladio (Pd) y rodio (Rh).
 - **Catalizador:** Metales nobles como platino (Pt), paladio (Pd) y rodio (Rh), depositados sobre soportes cerámicos como cordierita recubierta de alúmina.
 - **Condiciones típicas:**
 - Temperatura de operación: 200–800 °C
 - Flujo de gases de escape (CO, NO_x, HC)



1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.3. Catálisis Ambiental.

- ❖ Reducción catalítica selectiva (SCR): usada en plantas industriales y vehículos diésel para transformar NO_x en nitrógeno (N_2) y agua mediante el uso de amoníaco o urea y catalizadores basados en óxidos metálicos (como vanadio o zeolitas modificadas).
 - **Catalizador:** Óxidos de vanadio (V_2O_5), molibdeno (MoO_3), tungsteno (WO_3) soportados en TiO_2 , o zeolitas con Cu o Fe (por ejemplo, Cu-SSZ-13).
 - **Condiciones típicas:**
 - Temperatura: 200–450 °C
 - Reductor: Amoníaco (NH_3) o urea

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.3. Catálisis Ambiental.

- ❖ Oxidación catalítica de compuestos orgánicos volátiles (COVs): destruye contaminantes gaseosos provenientes de procesos industriales, mejorando la calidad del aire.
 - **Catalizador:** Óxidos metálicos (MnO_2 , CuO , Co_3O_4) o metales nobles como Pt y Pd..
 - **Condiciones típicas:**
 - Temperatura: 250–500 °C
 - Presión: atmosférica

Estas tecnologías son esenciales para cumplir con normas ambientales y reducir el impacto ecológico de diversas actividades humanas.

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.4. Otras Aplicaciones Relevantes.

- ❖ **Producción de hidrógeno:** mediante reformado de metano con vapor o descomposición de amoníaco.
 - **Catalizador:** Níquel (Ni) soportado en Al_2O_3 o MgAl_2O_4 .
 - **Condiciones típicas:**
 - Temperatura: 700–900 °C
 - Presión: 20–30 atm
 - Relación $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4 \approx 2-3$
 - **Reacción principal:**



1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.4. Otras Aplicaciones Relevantes.

- ❖ **Síntesis de metanol y otros alcoholes:** a partir de gas de síntesis ($\text{CO} + \text{H}_2$).
 - **Catalizador:** $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$.
 - **Condiciones típicas:**
 - Temperatura: 200–300 °C
 - Presión: 50–100 atm
 - Reactantes: $\text{CO} + \text{H}_2$ o $\text{CO}_2 + \text{H}_2$
- ❖ **Procesos de valorización de biomasa:** como la conversión catalítica de azúcares y residuos orgánicos en biocombustibles.
- ❖ **Industria química fina y farmacéutica:** donde la catálisis heterogénea se aplica para hidrogenaciones selectivas, oxidaciones suaves, etc.

1.3. Aplicaciones Clave de la Catálisis Heterogénea

1.3.4. Otras Aplicaciones Relevantes.

- ❖ La catálisis heterogénea es una tecnología transversal, presente en sectores estratégicos como la energía, la agricultura, el transporte, la industria química y la protección ambiental. Su optimización y desarrollo son clave para avanzar hacia una química más sostenible, eficiente y respetuosa con el medio ambiente.
- ❖ Cada aplicación de la catálisis heterogénea requiere un diseño específico de catalizador adaptado a las condiciones extremas de presión, temperatura, composición de reactivos y objetivos del proceso. La elección del catalizador adecuado es esencial para lograr alta actividad, selectividad, estabilidad térmica y facilidad de regeneración, lo cual es fundamental en entornos industriales donde la eficiencia y la economía de operación son prioritarias.

