

Se ha comprobado que la velocidad de un gran número de reacciones está afectada por la presencia de sustancias que no son los reactantes originales ni los productos finales de la reacción. Estas sustancias, llamadas catalizadores, pueden retardar las reacciones, en cuyo caso se denominan catalizadores negativos, o aumentar su velocidad, llamándose entonces catalizadores positivos. Los catalizadores pueden ser sólidos o fluidos. Por lo tanto un catalizador es una sustancia que afecta la velocidad de una reacción, pero sale del proceso sin sufrir cambios. Un catalizador por lo general afecta la reacción promoviendo un camino (mecanismo) molecular diferente para la reacción. Un catalizador modifica sólo la velocidad de una reacción, no afecta el equilibrio.

Las reacciones catalizadas por sólidos generalmente implican rupturas o uniones de alta energía y juegan un papel importante en muchos procesos industriales, como, por ejemplo, en la producción del metanol, amoníaco, ácido sulfúrico, y varios productos petroquímicos. Consideremos una fracción del petróleo natural; como está formado por una mezcla de muchos componentes, principalmente hidrocarburos, su tratamiento en condiciones extremas conducirá a una variedad de cambios que se efectúan simultáneamente, dando lugar a una serie de compuestos, unos deseables y otros no. Aunque frecuentemente un catalizador puede hacer variar la velocidad de las reacciones en miles o millones de veces también se encuentra, para muchas reacciones, que la característica más importante de un catalizador es su selectividad. Entendemos por selectividad la propiedad del catalizador que permite modificar solamente la velocidad de ciertas reacciones, muchas veces la de una reacción determinada, no afectando a las demás. De este modo, en presencia de un catalizador adecuado pueden obtenerse productos que contengan predominantemente las sustancias deseadas a partir de una alimentación determinada.

A continuación se hacen algunas indicaciones de tipo general, sobre los catalizadores:

1. No se conoce bien el modo de seleccionar un catalizador para promover una reacción específica; por consiguiente, en la práctica se necesita realizar una amplia serie de ensayos para lograr un catalizador satisfactorio.
2. La reproducción de la constitución química de un buen catalizador no es una garantía de que el sólido obtenido tenga actividad catalítica.
3. La característica anterior, nos sugiere que lo que imprime actividad catalítica a una sustancia es su estructura física o cristalina. Esta afirmación está reforzada por el hecho de que calentando un catalizador por encima de una temperatura crítica determinada puede perder su actividad, a veces para siempre. En consecuencia, la investigación actual sobre catalizadores está centrada fundamentalmente en la estructura de la superficie de los sólidos.
4. Para explicar la acción de los catalizadores se admite que las moléculas reactantes se están modificando de algún modo, energizándose, o formando productos intermedios en las regiones próximas a la superficie del catalizador; se han propuesto varias teorías para explicar los detalles de este comportamiento. En una de las teorías se supone que el producto intermedio es como una asociación de una molécula de reactante con una región de la superficie; es decir, las moléculas están ligadas de algún modo a la superficie. En otra teoría, se supone que las moléculas se mueven en el entorno próximo a la superficie y están bajo la influencia de las fuerzas de superficie; de acuerdo con esta teoría las moléculas son móviles aunque están modificadas por las fuerzas de superficie. En una tercera teoría se supone que se forma un complejo activado (un radical libre) en la superficie del catalizador; después este radical libre se mueve hacia el seno de la corriente gaseosa provocando una cadena de reacciones con nuevas moléculas antes de ser finalmente destruido. En contraste con las dos primeras teorías, que consideran que la reacción tiene lugar en las inmediaciones de la superficie. Esta tercera teoría considera a la superficie del catalizador como un simple generador de radicales libres, verificándose la reacción en el seno del gas.
5. De acuerdo con la teoría del estado de transición, el catalizador reduce la barrera de energía potencial, que ha de sobrepasarse para que los reactantes puedan formar productos. Esta disminución de energía está reflejada en la correspondiente disminución de la energía de activación para la reacción, y en consecuencia, en un aumento de la velocidad de reacción. En la Figura 1 se muestra este descenso en la barrera de energía.

- Aunque un catalizador puede aumentar la velocidad de una reacción, nunca determina el equilibrio o punto final de una reacción, que está regido solamente por la termodinámica. Es decir, con o sin catalizador, la constante de equilibrio para la reacción es siempre la misma.
- Como la superficie sólida es la responsable de la actividad catalítica, se ha de procurar que los catalizadores tengan una gran superficie fácilmente accesible en materiales de fácil manejo. Por diferentes métodos pueden obtenerse áreas de superficie activa del tamaño de campos de fútbol por centímetros de catalizador.

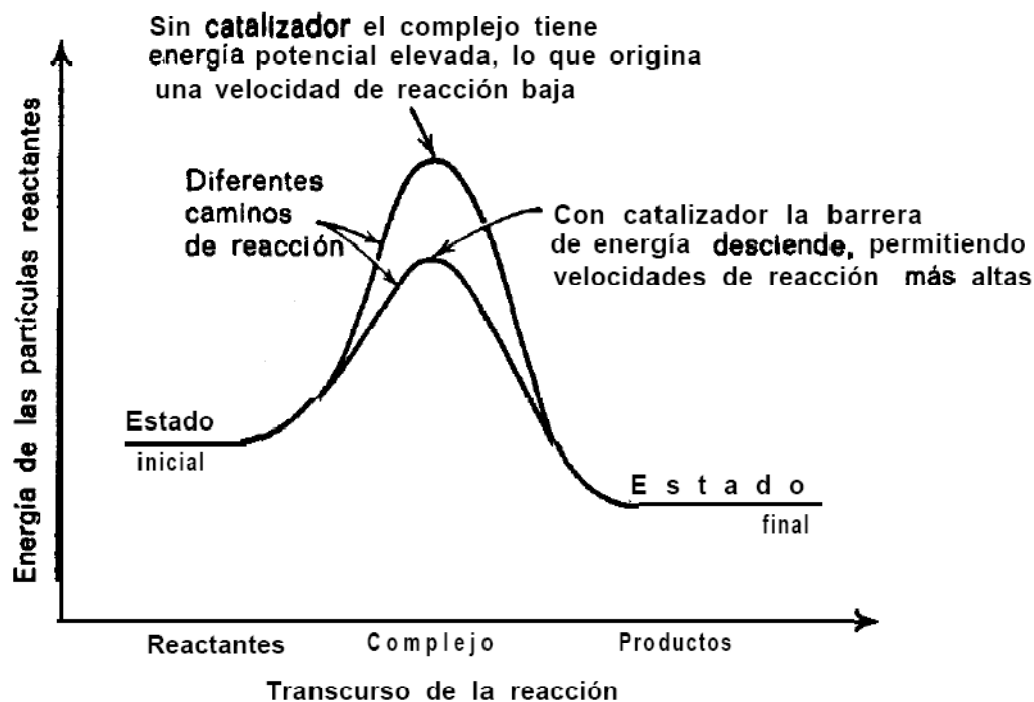


Figura 1. Representación de la acción de un catalizador.

TIPOS DE REACCIONES Y CATALIZADORES REPRESENTATIVOS

Reacción	Catalizadores
Halogenación-Deshalogenación	CuCl ₂ , AgCl, Pd
Hidratación-Deshidratación	Al ₂ O ₃ , MgO
Alquilación-Desalquilación	AlCl ₃ , Pd
Hidrogenación-Deshidrogenación	Co, Pt, Cr ₂ O ₃ , Ni
Oxidación	Cu, Ag, Ni, V ₂ O ₅
Isomerización	AlCl ₃ , Pt/Al ₂ O ₃ , Zeolitas

PASOS DE UNA REACCIÓN CATALÍTICA

- Transferencia de masa (difusión) de los reactivos desde el seno del fluido hasta la superficie externa de la partícula de catalizador.
- Difusión del reactivo desde la boca del poro, a través de los poros del catalizador hasta las inmediaciones de la superficie catalítica interna.
- Adsorción del reactivo en la superficie del catalizador.
- Reacción en la superficie del catalizador.
- Desorción de los productos de la superficie.
- Difusión de los productos desde el interior de la partícula hasta la boca del poro en la superficie exterior.
- Transferencia de masa de los productos desde la superficie externa de la partícula hasta el seno del fluido.

Entre los pasos mencionados anteriormente, uno de los más relevantes es el proceso de adsorción del reactivo en la superficie del catalizador. Esta adsorción puede ser:

- Física: dependen de las fuerzas de dispersión de London-Van der Waals, de interacciones electrostáticas. Se habla de una fisisorción.
- Química: depende de enlaces covalentes o iónicos. Se habla de una quimisorción.
- No disociativa: cuando la especie no sufre un cambio en su estructura al momento de adsorberse sobre el catalizador.
- Disociativa: cuando la especie sufre un cambio en su estructura al momento de adsorberse sobre el catalizador.

Entre los factores que influyen en el proceso de adsorción se tiene que un incremento de la presión aumenta la probabilidad de choque entre moléculas y sitio activo. Un incremento de la temperatura disminuye el fenómeno de adsorción. Un incremento de la concentración aumenta la adsorción por la mayor probabilidad de interacción.