

ASIGNATURA: 15693 - CINÉTICA QUÍMICA APLICADA

CENTRO: Escuela de Ingenierías Industriales y Civiles

TITULACIÓN: Ingeniero Químico

DEPARTAMENTO: QUÍMICA

ÁREA: Química Física

PLAN: 10 - Año 200**ESPECIALIDAD:**

CURSO: Tercer curso **IMPARTIDA:** Primer semestre **TIPO:** Troncal

CRÉDITOS: 6

TEÓRICOS: 4,5

PRÁCTICOS: 1,5

Descriptores B.O.E.

Cinética de las reacciones homogéneas y heterogéneas. Catálisis.

Temario

Tema 1. Elementos de Cinética Química: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

1. La reacción Química
2. Velocidad de Reacción
3. Aspectos termodinámicos
 - 3.1. El Equilibrio Químico
 - 3.2. La conversión de equilibrio
4. La ecuación cinética
 - 4.1. El orden de reacción
 - 4.2. Reacciones elementales y no elementales
 - 4.3. Influencia de la temperatura. Teoría de Arrhenius de la velocidad de reacción
5. La velocidad de reacción a partir de otras teorías
 - 5.1. Teoría de los choques
 - 5.2. Teoría del complejo activado

Tema 2. Ecuaciones cinéticas elementales: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

1. El mecanismo de la reacción
 - 1.1. Diagramas de Energía
 - 1.2. Concepto de etapa controlante
 - 1.3. Molecularidad y orden de reacción
2. Cinética de las reacciones elementales
 - 2.1. Reacciones bimoleculares
 - 2.2. Reacciones termoleculares
 - 2.3. Reacciones unimoleculares
3. Evolución de la concentración en las reacciones elementales
 - 3.1. Reacciones de primer orden

- 3.2. reacciones de orden n
- 3.3. Reacciones con más de un reactivo
- 3.4. Orden de reacción aparente

Tema 3. Reacciones no elementales: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

- 1. Introducción
 - 1.1. Reacciones no elementales
 - 1.2. Selectividad
- 2. Tipos de mecanismos de reacción
 - 2.1. Mecanismo con varias etapas en serie
 - 2.2. Mecanismo con reacciones en paralelo
 - 2.3. Reacciones autocatalíticas
- 3. Métodos simplificados para la integración de ecuaciones cinéticas
 - 3.1. Hipótesis de estado estacionario
 - 3.2. Hipótesis de etapas en equilibrio
- 4. Mecanismos de reacción en cadena
 - 4.1. Mecanismos de reacciones de polimerización
 - 4.2. Otras etapas de los mecanismos en cadena
- 5. Determinación del mecanismo de reacción

Tema 4. Métodos diferenciales para el análisis de datos: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

- 1. Obtención de datos experimentales
- 2. Los métodos diferenciales
- 3. Reacciones en las que interviene un único reactivo
 - 3.1. Método del tanteo
 - 3.2. Método de regresión lineal
 - 3.3. Método de regresión no lineal
- 4. Reacciones en las que interviene más de un reactivo
 - 4.1. Método del exceso
 - 4.2. Método de las cantidades estequiométricas
- 5. Reacciones reversibles
- 6. Sistemas de reacciones
 - 6.1. Reacciones en serie
 - 6.2. reacciones en paralelo
 - 6.3. Sistemas complejos
- 7. Estimación conjunta de todos los parámetros
- 8. Reactores para la obtención de datos cinéticos
 - 8.1. Reactor discontinuo
 - 8.2. Reactor de continuo de mezcla perfecta
 - 8.3. Reactor continuo de flujo pistón

Tema 5. Métodos integrales para el análisis de datos: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

- 1. Introducción
- 2. Reacciones en las que interviene un único reactivo
 - 2.1. Método de regresión lineal
 - 2.2. Método del tiempo de vida medio y otros fraccionales
 - 2.3. Método de regresión no lineal
- 3. Reacciones en las que interviene más de un reactivo
 - 3.1. Integración de las ecuaciones

- 3.2. Método del exceso
- 3.3. Método de las cantidades estequiométricas
- 4. Reacciones reversibles
- 5. Sistemas de reacciones
 - 5.1. Reacciones en serie
 - 5.2. Reacciones en paralelo
 - 5.3. Sistemas complejos
- 6. Reacciones con cambio de volumen
 - 6.1. Reactor discontinuo
 - 6.2. Reactor de continuo de mezcla perfecta
 - 6.3. Reactor continuo de flujo pistón

Tema 6. Reacciones en fase líquida y en disolución: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

- 1. Los sistemas líquidos
- 2. Los mecanismos de las reacciones en disolución
- 3. La velocidad de las reacciones en fase líquida
 - 3.1. Las constantes de equilibrio en fase gaseosa y en fase líquida
 - 3.2. Efecto de la presencia del disolvente sobre la velocidad de reacción
 - 3.3. Desviaciones del comportamiento ideal de la disolución
 - 3.4. Efecto de la polaridad del disolvente
 - 3.5. Efectos salinos de la disolución
 - 3.6. Efecto de los sustituyentes
 - 3.7. Efecto de la presión

Tema 7. Catálisis homogénea: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

- 1. El fenómeno de la catálisis
- 2. Funciones del catalizador
- 3. Mecanismos y ecuaciones cinéticas en reacciones catalizadas
- 4. Catálisis por ácidos y bases
 - 4.1. Catálisis específica
 - 4.2. Catálisis general
- 5. Otras reacciones catalíticas homogéneas

Tema 8 Catalizadores sólidos: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

- 1. Introducción
- 2. Estructura del catalizador sólido
- 3. Los materiales catalíticos
- 4. Las propiedades del catalizador sólido
 - 4.1. Propiedades físicas
 - 4.2. Propiedades químicas
 - 4.3. Propiedades catalíticas
- 5. Preparación de catalizadores sólidos
 - 5.1. Preparación de óxidos
 - 5.2. Catalizadores soportados
 - 5.3. Perfiles del componente activo en el soporte
 - 5.4. Activación
 - 5.5. Extracción de un componente
 - 5.6. Otros métodos de preparación
- 6. Catalizadores monolíticos

7. Técnicas de caracterización de los catalizadores sólidos
- 7.1. Estructura física
- 7.2. Estructura superficial
- 7.3. Otras técnicas de caracterización

Tema 9. Mecanismos de reacción sobre catalizadores sólidos: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

1. Reacciones químicas sobre catalizadores sólidos
- 1.1. Etapas en el mecanismo de reacciones catalizadas por sólidos
- 1.2. La ecuación cinética en reacciones catalizadas por sólidos
2. Las etapas Químicas
- 2.1. Leyes cinéticas y de equilibrio en las etapas químicas
- 2.2. Ecuación cinética cuando la etapa controlante es una reacción química
- 2.3. Ecuación cinética cuando la etapa controlante es la adsorción de reactivos
- 2.4. Ecuación cinética cuando la etapa controlante es la desorción de productos
- 2.5. Efecto de la presencia de especies inertes
- 2.6. Efecto del número de centros activos considerados
- 2.7. Estructura de las ecuaciones cinéticas en catálisis heterogenea
3. Las Etapas físicas
4. Gradientes externos de concentración
- 4.1. Gradientes externos de temperatura
- 4.2. Comprobación experimental del control de la difusión externa
5. Gradientes internos de concentración
- 5.1. Factor de eficacia
- 5.2. Gradientes internos de temperatura
- 5.3. Determinación experimental del factor de eficacia
- 5.4. Análisis de datos cinéticos en presencia de gradientes

Tema 10. Reacciones enzimáticas: (4 horas de teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

1. Introducción
2. Cinética homogénea enzimática
- 2.1. Cinética de Michaelis –Menten
- 2.2. Determinación de las constantes cinéticas
- 2.3. Cinética de la desactivación enzimática
3. Cinética en cultivos de células
- 3.1. Cinética del crecimiento de células
- 3.2. Cinética de la muerte de células
4. Cinética de reacciones enzimáticas heterogéneas
- 4.1. Gradientes de concentración en biocatalizadores

Tema 11. Cinética de las reacciones electroquímicas (4 horas teoría + 1 hora de problemas, simulaciones y seminarios):

1. Introducción
2. Fundamentos de las reacciones electroquímicas
3. Cinética de electrodo y efectos de la difusión
4. Reactores electrolíticos

Requisitos Previos

Conocimientos aptos de las asignaturas básicas de química de los cursos precedentes.

Objetivos

Con esta asignatura se pretende que el alumno adquiriera los fundamentos y principios de la Cinética Química y que comprenda que la obtención de la ecuación de velocidad de una reacción química dada es un paso previo imprescindible para diseñar el reactor y el proceso industrial dónde llevar a cabo dicha reacción.

Metodología

La materia teórica del curso se impartirá en cuatro horas de teoría propiamente dicha más una hora de resolución de cuestiones numéricas, teórico-prácticas por cada tema. Además, se realizarán seminarios acerca del uso de programas matemáticos que facilitan el cálculo en cinética.

Con el objeto de facilitar el proceso de aprendizaje por parte del alumno. Se tratará de suministrar un material escrito de todos los temas incluidos en el programa de la asignatura así como una relación de problemas resueltos y los enunciados de los problemas que los alumnos deberán resolver.

Es posible, si se solicitara por parte de los alumnos, organizar sesiones de Seminarios para resolver las dudas sobre los conceptos que se vayan estudiando, así como aquellos aspectos de la resolución de problemas que presenten mayores dificultades para el alumno. Estos seminarios son voluntarios, exigiéndose una presencialidad de al menos un 30% del total de matriculados.

Criterios de Evaluación

Teniendo en cuenta el carácter cuatrimestral de esta asignatura se realizará un examen final que constará de cuestiones teóricas y de problemas. Si los alumnos lo desean se puede realizar un examen previo al final de carácter eliminatorio. La puntuación de las cuestiones teóricas es el 35% del examen, la de los problemas es el 65%.

Además del examen que supone el 90% del global de la calificación, el 10% restante de la nota se completará con:

- Tareas a través del campus virtual.
- Asistencia activa a Seminarios de dudas si se plantearan.

El examen tendrá una duración improrrogable de 3 horas.

Descripción de las Prácticas

La asignatura comprende 1,5 créditos prácticos, principalmente orientados a la realización de cálculos cinéticos de procesos a partir de valores experimentales extraídos de la bibliografía (problemas y simulaciones) y seminarios de análisis de casos prácticos.

Bibliografía

[1 Básico] Elementos de ingeniería de las reacciones químicas /

*H. Scott Fogler ; traducción María Teresa Aguilar Ortega ; revisión técnica Román Ramírez López...[et al.].
Pearson Educacion,, México : (2008) - (4ª ed.)
9789702611981*

[2 Básico] Cinética química aplicada I

Juan Ramón González Velasco... [et al.].

Síntesis,, Madrid : (1999)

8477386668

[3 Básico] Fundamentos de cinética química.

Logan, S. R.

Addison Wesley Iberoamericana,, Madrid [etc.] : (2000)

8478290303

[4 Recomendado] Cinética química /Síntesis,

Ángel González Ureña.

..T260:

(2001)

8477389071

[5 Recomendado] Ingeniería de reactores I

Jesús M. Santamaría... [et al.].

Síntesis,, Madrid : (1999)

[6 Recomendado] Ingeniería de las reacciones químicas I

Octave Levenspiel ; [versión

española por Gabriel Toja Barreiro].

Reverté,, Barcelona : (1979)

8429173250

[7 Recomendado] Ingeniería de la cinética química I

por J. M. Smith.

Compañía Editorial Continental,, México : (1967) - ([2ª impresión].)

[8 Recomendado] Ingeniería de las reacciones químicas.

Sebastián O. Pérez Báez, Antonio Gómez Gotor.

Gobierno de Canarias, Consejería de Educación,

Cultura y Deportes,, Santa Cruz de Tenerife : (1997)

8483090252

[9 Recomendado] Problemas y cuestiones de ingeniería de las reacciones químicas I

Sebastián Ovidio Pérez Báez, Antonio Gómez Gotor.

Bellisco,, Madrid : (1998)

849300023X

Equipo Docente

OSCAR MANUEL GONZÁLEZ DÍAZ

(COORDINADOR)

Categoría: TITULAR DE UNIVERSIDAD

Departamento: QUÍMICA

Teléfono: 928457298 **Correo Electrónico:** oscar.gonzalez@ulpgc.es

Resumen en Inglés

Chemical kinetic of Homogeneous and Heterogeneous reactions. Catalysis.