

**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

Asignatura extinta con los nuevos Planes de Estudio. Sólo se harán los correspondientes exámenes (EVALUACIÓN).

## Criterios de Evaluación

Asignatura extinta con los nuevos Planes de Estudio. Sólo se harán los correspondientes exámenes (EVALUACIÓN).

## Descripción de las Prácticas

Asignatura extinta con los nuevos Planes de Estudio. Sólo se harán los correspondientes exámenes (EVALUACIÓN).

## 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 /

*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 /

*Jesús M. Santamaría... [et al.].*  
Síntesis,, Madrid : (1999)

---

**[6 Recomendado] Ingeniería de las reacciones químicas /**

*Octave Levenspiel ; [versión  
española por Gabriel Toja Barreiro].  
Reverté,, Barcelona : (1979)  
8429173250*

---

**[7 Recomendado] Ingeniería de la cinética química /**

*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 /**

*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.