

CINÉTICA QUÍMICA APLICADA

CURSO 2016 -2017

| MÓDULO | MATERIA | CURSO | SEMESTRE | CRÉDITOS | TIPO |
|---|-----------------------------------|-------|--|----------|-------------|
| TECNOLOGÍA ESPECÍFICA: QUÍMICA INDUSTRIAL | INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA | 3º | 1º | 6 | Obligatoria |
| PROFESOR(ES) | | | DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.) | | |
| Antonia Reyes Requena Miguel García Román | | | ANTONIA REYES REQUENA Departamento Ingeniería Química, Despacho nº 6, 2ªPlanta Tfno. 958 249018, areyesr@ugr.es | | |
| | | | MIGUEL GARCIA ROMAN Departamento Ingeniería Química, Despacho nº4, 1ªPlanta 958 241392, mgroman@ugr.es | | |
| | | | HORARIO DE TUTORÍAS | | |
| | | | ANTONIA REYES REQUENA Lunes 10:30 a 11:30; Martes de 9:30 a 12:30 y Jueves de 9:30 a 10:30 y 12:30 a 13:30 Dpto. de Ingeniería Química | | |
| | | | MIGUEL GARCIA ROMAN Martes de 10:30 a 12:30 y Viernes de 10:00 a 13:00 Dpto. de Ingeniería Química | | |
| GRADO EN EL QUE SE IMPARTE | | | OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR | | |
| Grado en Ingeniería Química | | | Grado en Ciencias Químicas como un curso de aplicaciones prácticas de la Cinética Química. | | |
| PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede) | | | | | |
| Es recomendable tener cursadas las asignaturas Matemáticas I, II y III, Física I, Química Física, Termodinámica Química Aplicada Tener conocimientos adecuados sobre: <ul style="list-style-type: none"> • Comprensión de textos en inglés científico. • Principios de la Termodinámica. | | | | | |



- Propiedades físico-químicas.
- Cálculo diferencial e integral.
- Álgebra de matrices.
- Fundamentos de cálculo numérico.
- Cinética formal y molecular.
- Fenómenos de Transporte.

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL GRADO)

Cinética de las reacciones homogéneas. Interpretación de los resultados experimentales. Sistemas gas-líquido: aceleración química de la absorción de un gas en una fase líquida. Sistemas fluido-sólido: modelos cinéticos. Catálisis heterogénea. Cinética de las reacciones en fase fluida catalizadas por sólidos. Interacción entre la reacción química y la difusión en los poros. Desarrollo de catalizadores sólidos. Reactores homogéneos ideales. Estabilidad de los reactores homogéneos. Flujo real: Función de distribución de tiempos de residencia. Reactores gas-líquido: tanques de burbujeo agitados y columnas de relleno. Reactores con catalizadores sólidos: lecho fijo, lecho fluidizado y lecho móvil. Desactivación rápida del catalizador: sistemas reactor-regenerador. Reactores multifásicos. Reactores enzimáticos: homogéneos, con enzimas inmovilizadas y reactores de membrana, Biorreactores. Fotobiorreactores.

COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS

Básicas y Generales:

- *CG02 - Saber aplicar los conocimientos de Ingeniería Química al mundo profesional, incluyendo la capacidad de resolución de cuestiones y problemas con iniciativa, toma de decisiones, creatividad y razonamiento crítico.*
- *CG03 - Adquirir la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes dentro del área de la Ingeniería Química, así como de extraer conclusiones y reflexionar críticamente sobre las mismas.*
- *CG04 - Saber transmitir de forma oral y escrita información, ideas, problemas y soluciones relacionados con la Ingeniería Química, a un público tanto especializado como no especializado.*
- *CG05 - Haber desarrollado las habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores de especialización con un alto grado de autonomía.*
- *CG08 - Trabajo en equipo*
- *CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio*
- *CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética*
- *CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado*
- *CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.*

Competencias Específicas:

- CE20 - Conocimientos sobre ingeniería de la reacción química, diseño de reactores. Biotecnología

OBJETIVOS (EXPRESADOS COMO RESULTADOS ESPERABLES DE LA ENSEÑANZA)

Al finalizar esta materia el alumno deberá:



- Desarrollar modelos cinéticos para los procesos químicos.
- Plantear e interpretar la investigación experimental de la cinética de un proceso químico.
- Desarrollar modelos de reactores para su diseño y la optimización de su funcionamiento.
- Analizar la estabilidad de los reactores químicos y su control.
- Aplicar e interpretar las Técnicas Estimulo-Respuesta para determinar la función de tiempos de residencia y caracterizar el flujo real por los aparatos químicos.
- Analizar sistemas utilizando balances de materia y energía y la cinética de los fenómenos de transporte y procesos químicos que tienen lugar.
- Realizar estudios bibliográficos relacionados con la ingeniería de la reacción química, sintetizar resultados trabajando de forma individual o en equipo y presentar los resultados de forma oral o escrita.
- Adquirir la formación y herramientas necesarias para aprender por sí mismo los métodos utilizados en el tratamiento de sistemas no considerados en el Temario.

TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

TEMARIO TEÓRICO:

- Introducción. Cálculos estequiométricos. Conversión del reactivo limitante y extensión de la reacción.
- Tema 1. Ecuación de velocidad de reacción en sistemas homogéneos. Reacciones reversibles y prácticamente irreversibles. Sistemas líquidos y gaseosos.
- Tema 2. Mecanismos de reacción. Aproximación de etapa controlante y de estado estacionario para los intermedios. Catálisis homogénea. Reacciones enzimáticas.
- Tema 3. Influencia de la temperatura sobre los parámetros cinéticos. Constantes cinéticas elementales. Ecuación de Arrhenius. Teoría de las velocidades absolutas de reacción. Influencia de la temperatura sobre las constantes de Equilibrio. Ecuación de van't Hoff.
- Tema 4. Determinación experimental de la ecuación de velocidad de reacción. Planificación de los experimentos. Congelación de la reacción. Tipos de reactores de Laboratorio.
- Tema 5. Métodos integral y diferencial de interpretación de resultados cinéticos. Método de las velocidades iniciales de reacción. Ajuste de los resultados experimentales: diferenciación numérica de datos discretos.
- Tema 6. Catálisis heterogénea. Adsorción. Adsorción física y quimisorción. Preparación de catalizadores sólidos. Tipos de reactores de Laboratorio con catalizadores sólidos.
- Tema 7. Propiedades de los catalizadores sólidos. Área superficial específica y volumen de poros. Ecuación BET. Penetración de mercurio: distribución de tamaños de poros.
- Tema 8. Mecanismos de las reacciones en fase fluida catalizadas por sólidos. Influencia de los fenómenos de transporte externos y en el interior de los poros. Forma general de las ecuaciones cinéticas.
- Tema 9. Difusión y reacción en un medio poroso. Factor de efectividad. Generalización para diferentes geometrías y diferentes ecuaciones cinéticas. Influencia de la transmisión de calor.
- Tema 10. Reacciones gas-líquido. Interacción entre la transferencia de materia y la reacción química. Factor de aceleración química. Regímenes de funcionamiento: reacción lenta, rápida e instantánea.

TEMARIO PRÁCTICO:

Seminarios/Talleres, Aula de Informática.

- 1) Aplicación del método integral.
- 2) Aplicación del método diferencial.
- 3) Comparación métodos integral y diferencial.
- 4) Integración numérica del modelo cinético.
- 5) Propiedades de los catalizadores sólidos.
- 6) Cinética de las etapas superficiales.
- 7) Cálculo del factor de efectividad.
- 8) Cálculo del factor de aceleración química.



TRABAJOS PRÁCTICOS:

- Determinación de la ecuación cinética de una reacción homogénea: planificación de los experimentos e interpretación de los resultados. (En equipo, presentación por escrito y/o oral).

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL:

- SMITH, J.M.: *CHEMICAL ENGINEERING KINETICS*, 3ª Edición, McGraw-Hill (1981) ISBN 0-07-058710-8. La 2ª Edición ha sido traducida al castellano: *"Ingeniería de la Cinética Química"*, CECSA, México (1986).
- FROMENT, G.F. y BISCHOFF, K.B.: *CHEMICAL REACTOR ANALYSIS AND DESIGN*, John Wiley (1979) ISBN 0-471-02447-3.
- LEVENSPIEL, O.: *EL OMNIBRO DE LOS REACTORES QUÍMICOS REVERTE* (1986), TRADUCCIÓN DE J. COSTA LÓPEZ y L. PUIGJANER CORBELLA.
- SCOTT FOGLER, H.: *ELEMENTOS DE INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS*, Traducción de la 3ª ed., Pearson Educación, México (2001) ISBN 970-26-0079-0.
- BOUDART, M.: *CINÉTICA DE PROCESOS QUÍMICOS*, Alhambra (1974) ISBN 84-205-0475-0.
- IZQUIERDO J.F., CUNILL F., TEJERO J., IBORRA M., FITÉ C. *CINÉTICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS* Universidad de Barcelona (2004).

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

- *MANUAL DEL INGENIERO QUÍMICO*, R.H. Perry y D.H. Green, McGraw Hill (2001), ISBN 84-481-3008-1
- *ULLMANN'S ENCYCLOPEDIA OF INDUSTRIAL CHEMISTRY*, BIBLIOTECA FACULTAD DE CIENCIAS FCI/R 66 ULL ull
- McKETTA, J.J.: *ENCYCLOPEDIA OF CHEMICAL PROCESSING AND DESIGN*, M. Dekker(1976) BIBLIOTECA FACULTAD DE CIENCIAS FCI/R 66 ENC enc.

ENLACES RECOMENDADOS

Directorio de la asignatura a través de acceso identificado <https://www.ugr.es/csirc/servlet/AutenticadorServlet>

Plataforma docente <https://swad.ugr.es/swad?CodAsg=IQ31CQA>

Biblioteca de la Universidad de Granada <http://www.ugr.es/~biblio/>

Libros Electrónicos de Ingeniería

http://www.engineeringvillage2.org/controller/servlet/Controller?EISESSION=1_94257f12723b9fc20M2f92ses3&CID=ebookSearch&data_base=131072

Kayode A. *"Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design"* Gulf Professional EE.UU (2001)

METODOLOGÍA DOCENTE

1. LECCIÓN MAGISTRAL O EXPOSITIVA

Exposición en el aula de los contenidos propuestos junto con ejemplos de aplicación de los mismos. El estudio experimental de la cinética de una transformación química implica la aplicación de los conocimientos sobre mecanismos de reacción y teorías de las velocidades de reacción, ingeniería de la reacción química, competencia CT2, pero además los ejemplos desarrollados requieren también aspectos tratados en otras materias de la titulación, termodinámica, química, competencia CB4, transmisión de calor, competencia CR1, flujo de fluidos, competencia CR2, y técnicas matemáticas, competencias CB1 y CB3, que permiten al alumno integrar los conocimientos adquiridos hasta el momento, acostumbrándole a la resolución de problemas, competencia CI5, y reforzando su razonamiento crítico, competencia CP4.

30 horas presenciales.

2. RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS Y ESTUDIO DE CASOS PRÁCTICOS

Los sistemas homogéneos, más sencillos, permiten desarrollar de una manera más clara la aplicación de los métodos diferencial e integral de interpretación de datos cinéticos, e incluso el análisis de sistemas más complejos de reacciones químicas simultáneas, al mismo tiempo que obligan al alumno a tomar decisiones y analizar los resultados. Los mecanismos de las reacciones en sistemas heterogéneos permiten al alumno comprender la interacción entre la reacción química y los fenómenos de transporte, desarrollando su



capacidad de observación e interpretación de los resultados experimentales, competencias CG2, CG3 y CI1.

13 horas presenciales

3. PRÁCTICAS EN ORDENADORES

La planificación e interpretación de los experimentos cinéticos, desarrollada en forma secuencial, introduce al alumno en la investigación científica. La diferenciación de datos discretos con técnicas de splines u otras requiere el uso de un lenguaje de programación de alto nivel. En las clases prácticas desarrolladas en el Aula de Informática con los grupos pequeños, se proponen ejemplos de interpretación de datos cinéticos que obligan al alumno a tomar decisiones para encontrar la ecuación cinética más adecuada y hacer uso de técnicas matemáticas y estadísticas, competencias CB1 y CB3, y extraer conclusiones sobre los resultados, competencias CG2, CG3 y CI1.

13 horas presenciales.

4. TRABAJO EN EQUIPO

Los Trabajos en equipo, en subgrupos de tres alumnos, están diseñados para familiarizar al alumno con la investigación cinética: la planificación e interpretación de experimentos de forma secuencial. Estos Trabajos referidos a una ecuación estequiométrica sencilla serán entregados por escrito por los alumnos, y en ocasiones expuestos de forma oral ante el Profesor y sus compañeros del Grupo de Prácticas correspondiente, competencias CG4, CG5 y CI3.

PROGRAMA DE ACTIVIDADES

| Primer cuatrimestre | Temas del temario | Actividades presenciales (NOTA: Modificar según la metodología docente propuesta para la asignatura) | | | | | Actividades no presenciales (NOTA: Modificar según la metodología docente propuesta para la asignatura) | | | | |
|---------------------|-------------------|---|----------------------------|-----------------------------------|------------------|------|--|-----------------------------|---|--------------------------|------|
| | | Sesiones teóricas (horas) | Sesiones prácticas (horas) | Exposiciones y seminarios (horas) | Exámenes (horas) | Etc. | Tutorías individuales (horas) | Tutorías colectivas (horas) | Estudio y trabajo individual del alumno (horas) | Trabajo en grupo (horas) | Etc. |
| Semana 1 | 1 | 2.0 | | | | | | 6.0 | | | |
| Semana 2 | 2 | 2.0 | 1.0 P.1 | 1.0 | | | | 4.0 | | | |
| Semana 3 | 3 | 2.0 | 1.0 P.2 | 1.0 | | | | 4.0 | | | |
| Semana 4 | 4 | 2.0 | 1.0 P.3 | 1.0 | | | | 4.0 | | | |
| Semana 5 | 5 | 2.0 | 1.0 P.4 | 1.0 | | | | 4.0 | | | |
| Semana 6 | 6 | 2.0 | 1.0 P.5 | 1.0 | | | | 2.5 | 1.5 | | |
| Semana 7 | 7 | 2.0 | 1.0 | 1.0 | | | | 2.5 | 1.5 | | |
| Semana 8 | 8 | 2.0 | 1.0 P.6 | 1.0 | | | | 2.5 | 1.5 | | |
| Semana 9 | 9 | 2.0 | 1.0 | 1.0 | | | | 2.5 | 1.5 | | |



| | | | | | | | | | | |
|------------------------------------|----|------|-------------|------|------------|--|--|--|------|------|
| | | | P.7 | | | | | | | |
| Semana 10 | 10 | 2.0 | 1.0 P.8 | 1.0 | | | | | 2.5 | 1.5 |
| Semana 11 | 11 | 2.0 | 1.0 P.9 | 1.0 | | | | | 2.5 | 1.5 |
| Semana 12 | 12 | 2.0 | 1.0 Exp. | 1.0 | | | | | 2.5 | 1.5 |
| Semana 13 | 13 | 2.0 | 1.0 Exp. | 1.0 | | | | | 2.5 | 1.5 |
| Semana 14 | 14 | 2.0 | 1.0 Exp. | 1.0 | | | | | 4.0 | |
| Semana 15 | 14 | 2.0 | | | | | | | 6.0 | |
| Semana 16 Periodo no lectivo | | | | | | | | | 8.0 | |
| Semana 17 Periodo no lectivo | | | | | | | | | 8.0 | |
| Semana 18 Periodo no lectivo | | | | | | | | | 8.0 | |
| Semana 19 | | | | | Ex. 4.0 | | | | 2.0 | |
| Total horas | | 30.0 | 13.0 | 13.0 | 4.0 | | | | 78.0 | 12.0 |

EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)

Para evaluar la adquisición de los contenidos y competencias a desarrollar en esta materia se utilizará el siguiente sistema diversificado:

- Un Examen de curso, 4 horas, 3 ejercicios prácticos: interpretación de datos cinéticos en sistemas homogéneos y heterogéneos, planteamiento y cálculos realizables con una calculadora manual programable, 70 %.
- Un Trabajo de prácticas, en subgrupos de 3 alumnos, de los mismos cálculos anteriores, pero planificando también los experimentos, presentación por escrito, 20 %
- Asistencia a clases, 10 %.

Un examen extraordinario en Septiembre, equivalente al Examen de curso, continúan siendo válidos los trabajos de curso.

Evaluación única final para aquellos estudiantes a los que se les haya concedido, según la normativa de evaluación y calificación de los estudiantes de la Universidad de Granada aprobada el 20 de mayo de 2013. El periodo de solicitud de la evaluación única al Director del Departamento es dos semanas a partir de la fecha de matriculación del estudiante.

Constará de dos pruebas, una escrita y otra oral en las que se valorarán las competencias desarrolladas en la asignatura. Los



contenidos a evaluar corresponderán al temario detallado de la asignatura, la prueba escrita será equivalente al Examen de Curso y la prueba oral incluirá la planificación de experimentos para una investigación cinética.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Los cálculos prácticos de ajuste de resultados experimentales, aplicación de splines para la diferenciación numérica, e integración de modelos cinéticos homogéneos y heterogéneos implican la aplicación de métodos numéricos, cálculos iterativos e integración de sistemas de ecuaciones diferenciales no lineales, para su realización se dispone de las herramientas necesarias, pero una formación adecuada del alumno en su uso requiere una atención intensa por parte del Profesor que solo puede realizarse en grupos relativamente pequeños en un Aula de Informática durante las clases prácticas, máximo 10-20 alumnos.

