Guía docente de la asignatura



Fecha de aprobación: 28/06/2023

Cinética Química Aplicada (2201131)

Grado	Grado en Ingeniería Qu					Rama		Ingeniería y Arquitectura	
Módulo		Tecnología Específica: Química Industrial				Materia		Ingeniería de la Reacción Química	
Curso	3 ⁰)	Semestre	1 ⁰	Créditos	6	-	Гіро	Obligatoria

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

Se recomiendan unos conocimientos adecuados sobre:

- Comprensión de textos en inglés científico.
- Principios de la termodinámica, cálculo y estimación de propiedades fisicoquímicas.
- Cálculo diferencial e integral y álgebra de matrices.
- Fundamentos de cálculo numérico.
- Cinética formal y molecular.

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.

COMPETENCIAS ASOCIADAS A MATERIA/ASIGNATURA

COMPETENCIAS 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

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

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

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Al finalizar esta materia el alumnado deberá:

- Desarrollar modelos cinéticos para los procesos químicos.
- Plantear e interpretar la investigación experimental de la cinética de un proceso químico.
- 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

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

- 1. Introducción. Cálculos estequiométricos. Conversión del reactivo limitante y extensión de la reacción.
- 2. Ecuación de velocidad de reacción en sistemas homogéneos. Reacciones reversibles y prácticamente irreversibles. Sistemas líquidos y gaseosos.
- 3. Mecanismos de reacción. Aproximación de etapa controlante y de estado estacionario para los intermedios.
- 4. 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 vant´Hoff.
- 5. Determinación experimental de la ecuación de velocidad de reacción. Planificación de los experimentos. Congelación de la reacción. Tipos de reactores de laboratorio.
- 6. 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.
- 7. Reacciones gas-líquido. Interacción entre la transferencia de materia y la reacción química. Factor de aceleración química.
- 8. Catálisis homogénea. Reacciones enzimáticas.
- 9. Catálisis heterogénea. Adsorción. Adsorción física y quimisorción. Preparación de catalizadores sólidos. Tipos de reactores de laboratorio con catalizadores sólidos.
- 10. Propiedades de los catalizadores sólidos. Área superficial específica y volumen de poros. Ecuación BET. Distribución de tamaños de poros.
- 11. Mecanismos de las reacciones en fase fluida catalizadas por sólidos. Forma general de las ecuaciones cinéticas.
- 12. Influencia del transporte de materia. Difusión y reacción en un medio poroso. Factor de efectividad.



PRÁCTICO

Seminarios/talleres (requieren del uso de ordenador personal)

- Aplicación del método integral.
- Aplicación del método diferencial.
- Comparación métodos integral y diferencial.
- Integración numérica del modelo cinético.
- Propiedades de los catalizadores sólidos.
- Cinética de las etapas superficiales.

Trabajos prácticos:

- Determinación de la ecuación cinética de una reacción homogénea mediante el uso de un laboratorio virtual: planificación de los experimentos e interpretación de los resultados. (En grupo, presentación por escrito).
- Trabajo bibliográfico sobre catálisis heterogénea.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- Izquierdo Torres, J.F., Izquierdo Ramonet, M. CINÉTICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, 2ª Edición, Barcelona, 2019. Disponible en BIBLIOTECA CIENCIAS (FCI/66 IZQ cin 2019)
- Smith, J.M. INGENIERÍA DE LA CINÉTICA QUÍMICA, Compañía Editorial Continental, Méjico, 1986. Disponible en BIBLIOTECA CIENCIAS (FCI/66 SMI ing)
- Froment, G.F., Bischoff, K.B. CHEMICAL REACTOR ANALYSIS AND DESIGN, 2^a Edición, John Wiley & Sons, Nueva York, 1990. Disponible en BIBLIOTECA CIENCIAS (FCI/66 FRO
- Fogler, H.S. ELEMENTOS DE INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, traducción de la 3ª edición, Pearson Educación, México, 2001. Disponible en BIBLIOTECA CIENCIAS (FCI/66 FOG ele).
- Levenspiel, O. INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, traducción de la 2^a edición, Editorial Reverté, Barcelona, 1988. Disponible en BIBLIOTECA CIENCIAS (FCI/66 LEV ing). Hay una reimpresión posterior. También existe una tercera edición, no traducida al español: CHEMICAL REACTION ENGINEERING, John Wiley & Sons, Nueva York, 1999.
- González Velasco, J.R. CINÉTICA QUÍMICA APLICADA. Editorial Síntesis. Madrid, 1999. Disponible en BIBLIOTECA CIENCIAS (FCI/544 CIN cin).

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Green, & Southard, M. Z. Perry's chemical engineers' handbook (9^a ed). McGraw-Hill. (2019). Disponible en BIBLIOTECA POLITÉCNICA (BPOL/66 PER 2019).
- Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, ISBN: 9783527306732, DOI: 10.1002/14356007, Libro electrónico
- Heys, J.J. Chemical and biomedical engineering calculations using Python. John Wiley & Sons, Inc. (2017). Disponible en BIBLIOTECA CIENCIAS (FCI/66 HEY che).

ENLACES RECOMENDADOS

- Biblioteca de la Universidad de Granada
- West Virginia University Design Projects. Ejemplos de procesos químicos con datos



cinéticos.

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Lección magistral/expositiva
- MD02 Resolución de problemas y estudio de casos prácticos o visitas a industrias
- MD04 Prácticas en ordenadores

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

Se usarán las cuatro siguientes herramientas de evaluación (al final se especifica su peso en la calificación final):

- Examen final consistente en ejercicios y cuestiones teórico prácticas sobre ajuste e interpretación de datos cinéticos en sistemas homogéneos y heterogéneos, 60 %.
- Trabajo en grupo: Laboratorio virtual sobre planificación de experimentos e interpretación de datos cinéticos, presentación por escrito, 15%
- Trabajo individual de tipo bibliográfico, sobre catálisis heterogénea, 5%
- Evaluación final de prácticas: Prueba en aula de informática a resolver usando el software empleado en las clases prácticas, 20 %

Para superar la asignatura en la evaluación ordinaria será necesario alcanzar al menos el 40% de la calificación máxima tanto en el examen final como en la evaluación final de prácticas. Además, deberán haberse entregado el trabajo en grupo y el individual.

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

Se usarán las dos siguientes herramientas de evaluación (al final se especifica su peso en la calificación final):

- Examen con ejercicios y cuestiones teórico prácticas, sobre ajuste e interpretación de datos cinéticos en sistemas homogéneos y heterogéneos, 70 %.
- Evaluación de prácticas: Constará de un ejercicio de planificación de experimentos (10%) y un examen en aula de informática a resolver usando el software empleado en las clases prácticas (20%), en total el 30% de la calificación final.

Para superar la asignatura en la evaluación extraordinaria será necesario alcanzar al menos el 50% de la calificación máxima tanto en el examen como en la evaluación de prácticas. Quiénes, estando en disposición de ello, así lo soliciten podrán conservar las calificaciones de la evaluación ordinaria del trabajo en grupo (10%) y de la evaluación final de prácticas (20%), que supondrán en conjunto un 30% de la nota final en esta convocatoria. De esta forma no tendrán que realizar nuevamente la evaluación de prácticas.

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

Los contenidos a evaluar corresponderán al temario detallado de la asignatura, tanto en la parte teórica como en la parte de resolución de problemas. Constará de dos pruebas, una escrita y otra en aula de informática en las que se valorarán las competencias desarrolladas en la asignatura.

• Examen con ejercicios y cuestiones teórico – prácticas, sobre ajuste e interpretación de datos cinéticos en sistemas homogéneos y heterogéneos, 70% de la calificación final.



• Evaluación de prácticas: Constará de un ejercicio de planificación de experimentos (10%) y un examen en aula de informática a resolver usando el software empleado en las clases prácticas (20%), en total el 30% de la calificación final.

Para superar la asignatura mediante esta modalidad de evaluación será necesario alcanzar al menos el 50% de la calificación máxima tanto en el examen como en la evaluación de prácticas.

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 alumnado en su uso requiere una atención intensa por parte del profesor que solo puede realizarse en grupos relativamente pequeños durante las clases prácticas, máximo 10-20 estudiantes.