

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
TECNOLOGÍA ESPECÍFICA: QUÍMICA INDUSTRIAL	INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA	3	5	6	Obligatoria
<b>PROFESOR(ES)</b>			<b>DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)</b>		
<p><b>Antonia Reyes Requena</b>  <b>Germán Luzón González</b>  <b>Miguel García Román</b></p>			<p><b>ANTONIA REYES REQUENA</b>                      Departamento Ingeniería Química, Despacho nº 6, 2ªPlanta                      Tfno. 958 249018, <a href="mailto:areyesr@ugr.es">areyesr@ugr.es</a></p> <p><b>GERMÁN LUZÓN GONZÁLEZ</b>                      Departamento Ingeniería Química, Despacho nº 15, 2ªPlanta                      Tfno. 958 248844, <a href="mailto:german@ugr.es">german@ugr.es</a></p> <p><b>MIGUEL GARCÍA ROMÁN</b>                      Departamento Ingeniería Química, Despacho nº4, 1ªPlanta                      Tfno. 958 241392, <a href="mailto:mgroman@ugr.es">mgroman@ugr.es</a></p>		
			<b>HORARIO DE TUTORÍAS</b>		
			<p><b>ANTONIA REYES REQUENA</b>  <a href="http://sl.ugr.es/areyesr">http://sl.ugr.es/areyesr</a></p> <p><b>GERMÁN LUZÓN GONZÁLEZ</b>  <a href="http://sl.ugr.es/german">http://sl.ugr.es/german</a></p> <p><b>MIGUEL GARCIA ROMAN</b>  <a href="http://sl.ugr.es/mgroman">http://sl.ugr.es/mgroman</a></p>		
<b>GRADO EN EL QUE SE IMPARTE</b>			<b>OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR</b>		
Grado en Ingeniería Química			Grado en Ciencias Químicas como un curso de aplicaciones prácticas de la Cinética Química.		
<b>PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)</b>					

Tener conocimientos adecuados sobre:

- 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.

### **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.
- 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. Reacciones gas-líquido. Interacción entre la transferencia de materia y la reacción química. Factor de aceleración química.
- Tema 7. Catálisis heterogénea. Adsorción. Adsorción física y quimisorción. Preparación de catalizadores sólidos. Tipos de reactores de laboratorio con catalizadores sólidos.
- Tema 8. Propiedades de los catalizadores sólidos. Área superficial específica y volumen de poros. Ecuación BET. Distribución de tamaños de poros.
- Tema 9. Mecanismos de las reacciones en fase fluida catalizadas por sólidos. Forma general de las ecuaciones cinéticas.
- Tema 10. Influencia del transporte de materia. Difusión y reacción en un medio poroso. Factor de efectividad.

### 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.

### 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).
- Caracterización de catalizadores sólidos. Trabajo bibliográfico.

## BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL:



- 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, 2ª Edición, John Wiley & Sons, Nueva York, 1990. Disponible en BIBLIOTECA CIENCIAS (FCI/66 FRO che)
- 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). Hay una última edición en inglés: ESSENTIALS OF CHEMICAL REACTION ENGINEERING, Prentice Hall, Boston, 2011.
- Levenspiel, O. INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS, traducción de la 2ª 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:

- *MANUAL DEL INGENIERO QUÍMICO*, R.H. Perry y D.H. Green, McGraw Hill (2008), ISBN 84-481-3008-1
- *ULLMANN'S ENCYCLOPEDIA OF INDUSTRIAL CHEMISTRY*, BIBLIOTECA FACULTAD DE CIENCIAS
- McKETTA, J.J.: *ENCYCLOPEDIA OF CHEMICAL PROCESSING AND DESIGN*, M. Dekker(1976) BIBLIOTECA FACULTAD DE CIENCIAS FCI/R 66 ENC enc.

#### ENLACES RECOMENDADOS

Biblioteca de la Universidad de Granada <https://biblioteca.ugr.es/>

West Virginia University Design Projects. Ejemplos de procesos químicos con datos cinéticos.

<https://cbe.statler.wvu.edu/undergraduate/projects>

#### METODOLOGÍA DOCENTE

##### AF1. 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, acostumbándole a la resolución de problemas, competencia CI5, y reforzando su razonamiento crítico, competencia CP4.

30 horas presenciales.

##### AF2.1 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

##### AF2.2. 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.

#### AF2.3. 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 secuenciada. 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 C13.

### **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:

#### CONVOCATORIA ORDINARIA

- Un examen de curso, con ejercicios y cuestiones teórico – prácticas, sobre interpretación de datos cinéticos en sistemas homogéneos y heterogéneos. Cálculos realizables con una calculadora manual programable, **60 %**.
- Trabajo en grupo: Laboratorio virtual sobre planificación de experimentos e interpretación de datos cinéticos, presentación por escrito, **15 %**
- Trabajo individual sobre catalizadores sólidos, **5%**
- Evaluación de prácticas: **20 %**.

#### CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

- Un examen con ejercicios y cuestiones teórico – prácticas, sobre interpretación de datos cinéticos en sistemas homogéneos y heterogéneos. Cálculos realizables con una calculadora manual programable, **70 %**.
- Evaluación de prácticas: **30 %**.

Los alumnos que lo soliciten podrán conservar las calificaciones del trabajo en grupo e individual así como la evaluación de las prácticas que supondrán en conjunto un 30% de la nota final. De esta forma quedarán exentos de realizar la evaluación de prácticas en esta convocatoria.

#### EVALUACIÓN ÚNICA FINAL (CONVOCATORIA ORDINARIA Y EXTRAORDINARIA)

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. Los contenidos a evaluar corresponderán al temario detallado de la asignatura, la prueba escrita será equivalente al Examen de Curso (70%) y la prueba en aula de informática incluirá la planificación y análisis de experimentos para una investigación cinética (30%).

### **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.

