

Asignatura: Cinética Química Aplicada

Siglas: CQA

Código: 15731

Versión: 2005

Tipo: Optativa	Créditos totales: 6	Horas/semana totales: 4
	Créditos presenciales Teoría: 1,5	Horas/semana presenciales Teoría: 1
	Créditos presenciales Problemas: 1,5	Horas/semana presenciales Problemas: 1
Cuadrimestre: Q3	Créditos presenciales Laboratorio: 1,5	Horas/semana presenciales Laboratorio: 1
	Créditos no presenciales: 1,5	Horas/semana no presenciales: 1

Áreas de conocimiento (BOE): Ingeniería Química. Fisicoquímica.

Descriptor (BOE): Cinética formal. Presentación y desarrollos de modelos cinéticos. Ajuste de modelos cinéticos a partir de la experimentación. Aplicaciones científico / tecnológicas.

Responsable: Tomás Alcaraz

Prerrequisitos:

Corequisitos:

Objetivos: Adquirir conocimientos básicos sobre la estructura y tipología de las ecuaciones cinéticas más importantes en función del tipo de mecanismo de las reacciones químicas. Conocimientos de técnicas de ajuste de modelos cinéticos a partir de resultados experimentales.

Programa:

Tema 1: Introducción a la cinética química. (1h)

Cinética y Termodinámica. Molecularidad. Criterios para la elucidación de mecanismos de reacción.

Tema 2: Parámetros que condicionan la velocidad de reacción. (14h)

Leyes fundamentales de velocidad de reacción. Constante de velocidad. Integración de ecuaciones de velocidad. Determinación del orden de reacción y de la constante de velocidad. Aplicaciones. Reacciones opuestas. Reacciones consecutivas. Reacciones competitivas. Aplicaciones. Métodos experimentales para la determinación de ecuaciones cinéticas: métodos diferenciales. Métodos de integración. Reacciones en fase gaseosa. Aplicaciones. Dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura. Ecuación de Arrhenius. Energía de activación: concepto y determinación. El complejo activado. Aplicaciones.

Tema 3: Teorías de la velocidad de reacción. (7h)

Teoría de las colisiones. Teoría de las velocidades absolutas. Formulación termodinámica de la ecuación de velocidad. Entropía de Activación. Aplicaciones. Teoría de las reacciones monomoleculares: teorías de Lindemann, Hindshelwood y Slater. Aplicaciones.

Tema 4: Reacciones en fase gaseosa. (4h)

Procesos con intervención de átomos y radicales libres. Tipos de reacciones complejas. Procesos en cadena lineal y en cadena ramificada. Aproximación del Estado Estacionario. Reacción hidrógeno-bromo. Descomposición térmica del acetaldehído. Polimerización por adición. Reacciones de auto oxidación en fase gaseosa. Reacción hidrógeno-oxígeno. Cinética de reacciones en cadena ramificada. Aplicaciones.

Tema 5: Reacciones en fase líquida. (5h)

Comparación de las reacciones en fase gaseosa y en fase líquida. Teoría del Estado de Transición para reacciones en fase líquida. Reacciones donde intervienen iones. Influencia del disolvente. Influencia de la fuerza de la disolución. Efecto de la presión en la velocidad de reacción. Aplicaciones.

Tema 6: Reacciones catalizadas. (5h)

Catálisis homogénea. Mecanismos y aplicaciones. Catálisis ácido-base. Mecanismos y aplicaciones. Catálisis heterogénea. Mecanismos y aplicaciones.

Tema 7: Reacciones fotoquímicas. (1,5h)

Leyes de la fotoquímica. Procesos a partir de moléculas excitadas. Reacciones fotolíticas: ejemplos. Reacciones fotosensibilizantes. Métodos experimentales.

Prácticas de Laboratorio:

1. Estudios cinéticos de la reacción entre el ion persulfato y el ion yoduro: determinación de la Constante Cinética. (4h)
2. Estudios cinéticos de la reacción entre el ion persulfato y el ion yoduro: determinación de la Energía de Activación. (3,5h)

Actividades No Presenciales:

1. Aplicaciones de cálculo de parámetro de la ecuación cinética de una reacción propuesta a partir de datos experimentales: constantes de velocidad, energías y entropías de activación (5h)
2. Aplicaciones en el ajuste de modelos cinéticos en datos experimentales con cálculo de parámetros.. (7h)
3. Estudios para análisis matemático de consistencia y mecanismos a partir de datos experimentales (3h)

Bibliografía Básica:

1. LAIDLER, K.I. "Cinética de Reacciones". Colección Exedra, nº 3 y nº 4. Ed. Alhambra. Madrid. 1979.
2. LAIDLER, K.I. "Chemical Kinetics" 3ª Edición. Harper an Row. N.Y. 1987.
3. LOGAN, S.R. "Fundamentos de Cinética Química". Addison Wesley Iberoamericana. Madrid. 2000.

Bibliografía Complementaria:

1. NICHOLAS, J.E. "Chemical Kinetics". Ed. Wiley. N.Y. 1976
2. MOORE, J.W. ; PEARSON, R.G. "Kinetics and Mechanism". 3ª Ed. Edición. Ed. Wiley-Interscience. 1981
3. WILKINSON, F. "Chemical Kinetics and Reaction Mechanism". Ed. Van Nostrand Reinhold. N.Y. 1980.

Sistema de evaluación:

Controles de seguimiento:	Primer: 30%	Segundo: 0%	Prueba final: 50%
No presencial:	10%	Prácticas: 10%	Otra: 0%