

**ESCOLA UNIVERSITÀRIA D'ENGINYERIA TÈCNICA INDUSTRIAL DE BARCELONA**

**ENGINYER TÈCNIC INDUSTRIAL. Especialitat en Química Ind.**

<b>Assignatura:</b>		<b>Cinètica Química Aplicada</b>		<b>Sigles:</b> CQA
				<b>Codi:</b> 15731
				<b>Versió:</b> 2005
<b>Tipus:</b> Optativa	<b>Crèdits totals:</b>	<b>6</b>	<b>Hores/setmana totals:</b>	<b>4</b>
	Crèdits presencials Teoria:	1,5	Hores/setmana presencials Teoria:	1
	Crèdits presencials Problemes:	1,5	Hores/setmana presencials Problemes:	1
<b>Quadrimestre:</b> Q3	Crèdits presencials Laboratori:	1,5	Hores/setmana presencials Laboratori:	1
	Crèdits no presencials:	1,5	Hores/setmana no presencials:	1
<b>Àrees de coneixement (BOE):</b> Enginyeria Química. Físicoquímica.				
<b>Descriptors (BOE):</b> Cinètica formal. Presentació i desenvolupaments de models cinètics. Ajust de models cinètics a partir de l'experimentació. Aplicacions científic/tecnològiques.				
<b>Responsable:</b> Tomás Alcaraz				
<b>Prerequisits:</b>				
<b>Corequisits:</b>				
<b>Objectius:</b> Assolir coneixements bàsics sobre l'estructura i tipologia de les equacions cinètiques més importants en funció del tipus de mecanisme de les reaccions químiques. Coneixements de tècniques d'ajust de models cinètics a partir de resultats experimentals.				
<b>Programa:</b>				
<b>Tema 1: Introducció a la cinètica química. (1h)</b> Cinètica i Termodinàmica. Molecularitat. Criteris per a l'elucidació de mecanismes de reacció.				
<b>Tema 2: Paràmetres que condicionen la velocitat de reacció. (14h)</b> Lleis fonamentals de velocitat de reacció. Constant de velocitat. Integració d'equacions de velocitat. Determinació de l'ordre de reacció i de la constant de velocitat. Aplicacions. Reaccions oposades. Reaccions consecutives. Reaccions competitives. Aplicacions. Mètodes experimentals per a la determinació d'equacions cinètiques: mètodes diferencials. Mètodes d'integració. Reaccions en fase gasosa. Aplicacions. Dependència de la velocitat de reacció amb la temperatura. Equació d'Arrhenius. Energia d'activació: concepte i determinació. El complex activat. Aplicacions.				
<b>Tema 3: Teories de la velocitat de reacció. (7h)</b> Teoria de les col·lisions. Teoria de les velocitats absolutes. Formulació termodinàmica de l'equació de velocitat. Entropia d'Activació. Aplicacions. Teoria de les reaccions monomoleculares: teories de Lindemann, Hindshelwood i Slater. Aplicacions.				
<b>Tema 4: Reaccions en fase gasosa. (4h)</b> Processos amb intervenció d'àtoms i radicals lliures: Tipus de reaccions complexes. Processos en cadena lineal i en cadena ramificada. Aproximació de l'Estat Estacionari. Reacció hidrògen-brom. Descomposició tèrmica de l'acetaldehid. Polimerització per addició. Reaccions d'autooxidació en fase gasosa. Reacció hidrògen-oxígen. Cinètica de reaccions en cadena ramificada. Aplicacions.				
<b>Tema 5: Reaccions en fase líquida. (5h)</b> Comparació de les reaccions en fase gasosa i en fase líquida. Teoria de l'Estat de Transició per a reaccions en fase líquida. Reaccions on intervenen ions. Influència del dissolvent. Influència de la força iònica de la dissolució. Efecte de la pressió en la velocitat de reacció. Aplicacions.				
<b>Tema 6: Reaccions catalitzades. (5h)</b> Catàlisi homogènia. Mecanismes i aplicacions. Catàlisi àcid-base. Mecanismes i aplicacions. Catàlisi heterogènia. Mecanismes i aplicacions.				
<b>Tema 7: Reaccions fotoquímiques. (1,5h)</b> Lleis de la fotoquímica. Processos a partir de molècules excitades. Reaccions fotolítiques: exemples. Reaccions fotosensibilitzades. Mètodes experimentals.				
<b>Pràctiques de Laboratori:</b>				

1. Estudis cinètics de la reacció entre l'io persulfat i l'io iodur: determinació de la Constant Cinètica. (4h)
2. Estudis cinètics de la reacció entre l'io persulfat i l'io iodur: determinació de l'Energia d'Activació. (3,5h)

**Activitats No Presencials:**

1. Aplicacions de càlcul de paràmetres de l'equació cinètica d'una reacció proposada a partir de dades experimentals: constants de velocitat, energies i entropies d'activació. (5h)
2. Aplicacions a l'ajust de models cinètics a dades experimentals amb càlcul de paràmetres. (7h)
3. Estudis per anàlisi matemàtica de consistència i mecanismes a partir de dades experimentals. (3h)

**Bibliografia Bàsica:**

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.

**Bibliografia Complementària:**

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 d'avaluació:**

Controls de seguiment:	Primer:	30%	Segon:	0%	Prova final:	50%
No presencialitat:	10%	Pràctiques:	10%	Altra:	0%	