



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de la Ciénega
División de Desarrollo Biotecnológico
INGENIERIA QUÍMICA

1. INFORMACIÓN DEL CURSO:

Nombre: Cinética Química y Catálisis	Clave: IQ-15829	Número de créditos: 9	
Departamento: Ciencias Tecnológicas	Horas teoría: 68 h	Horas Taller: 0h	Total de horas por cada semestre: 68 h
Tipo: Curso	Prerrequisitos: Termodinámica química aplicada		Nivel: 6º SEMESTRE Área de Formación: Básica Particular

2. DESCRIPCIÓN

Objetivo General:

El alumno será capaz de conocer, analizar y aplicar los principios, leyes, teorías, modelos y técnicas de análisis de datos cinéticos para la comprensión de los fenómenos de adsorción y reacciones catalíticas heterogéneas y homogéneas con el objeto de proponer los mecanismos de reacción, así como el diseño y selección de catalizadores para su aplicación en la industria de procesos químicos.

Contenido temático sintético (que se abordará en el desarrollo del programa y su estructura conceptual)

UNIDAD I. CINÉTICA

I.1. Análisis de la velocidad de las reacciones químicas.

I.1.1. Definición de velocidad de reacción.

I.1.2. Forma de las ecuaciones de velocidad de reacción y las leyes de velocidad de potencias.

I.1.3. Orden de reacción y constante de la ecuación de velocidad de Reacción.

I.1.4. Reacciones y equilibrio termodinámico.

I.1.5. Dependencia de la Temperatura de la velocidad de reacción.

I.1.6. Ecuaciones de velocidad integradas: Dependencia de las concentraciones en reacciones de órdenes diferentes.

I.1.7. El método integral.

I.1.8. El método diferencial.

I.1.9. Energía de activación aparente.

I.2. Interpretaciones moleculares de los fenómenos cinéticos.

I.2.1. Representaciones microscópicas de las transformaciones químicas.

I.2.2. Concepto de paso elemental y molecularidad.

I.2.3. Mecanismo de reacción

I.2.4. Análisis de datos cinéticos y establecimiento de mecanismos de

reacción a partir de datos cinéticos experimentales.

I.2.5. Concepto de paso limitante, estado estacionario y condición de cuasi-equilibrio.

I.3. Teorías moleculares de la cinética de las reacciones

I.3.1. Ley de Arrhenius

I.3.2. Teoría cinética de las colisiones.

I.3.2.1. Velocidad de las colisiones superficiales.

I.3.2.2. Probabilidad de reacción.

I.3.2.3. Teoría del estado transitorio – teoría del complejo activado.

I.3.2.4. Forma termodinámica de la expresión de la velocidad en el estado transitorio.

I.3.2.5. Teoría de las velocidades absolutas

I.4 Reacciones elementales en fase gaseosa

I.4.1. La teoría de Lindenmann.

I.4.2. Tratamiento de Hinshelwood

I.5. Reacciones complejas en fase gaseosa

I.5.1. Tratamiento del estado estacionario

UNIDAD II. CATÁLISIS HOMOGÉNEA EN SOLUCIÓN

II.1. Mecanismo general de la catálisis homogénea en solución

II.2. Catálisis ácido-base

II.3. Las relaciones de Brönsted

II.4. Funciones de acidez

II.5. Catálisis por enzimas

II.5.1. Ley de Michaelis-Menten

II.6. Reacciones en solución

II.6.1. Reacciones entre iones y dipolos

II.6.1.1. Influencia del disolvente

II.6.1.2. Influencia de la fuerza iónica

- II.6.3. Influencia de la presión sobre la velocidad de reacciones en solución
- II.6.4. Efecto de los sustituyentes sobre la velocidad de reacciones en solución
 - II.6.4.1 Relaciones libres de energía libre
 - II.6.4.2. La ecuación de Hammett
 - II.6.4.3. La ecuación de Taft

UNIDAD III. ASORCIÓN FÍSICA Y QUÍMICA

- III.1. Adsorción (Asociativa y Disociativa)
- III.2. Desorción
- III.3. Coadsorción
- III.4. Fisisorción (Adsorción física de N_2 , Ar, y la ecuación BET para la estimación del área superficial específica y distribución de tamaño de poros en sólidos porosos)
- III.5. Curvas de energía potencial (Potencial de Lennard-Jones, Potencial de Morse)
- III.6. Quimisorción (Quimisorción de H_2 y CO para la estimación de la dispersión metálica en un sólido poroso.
- III.7. Quimisorción Activada y no Activada.
- III.8. Isotermas de Adsorción Química y Física (Recubrimiento, Probabilidad de adherencia, Isotermas de: Langmuir, Freundlich, Henry, Temkin, adsorción de N_2)
- III.9. Calor de Adsorción
- III.10. Atrapamiento, probabilidad de adherencia, tiempo de residencia, recubrimiento, monocapa, unidades de Langmuir.

UNIDAD IV. CATÁLISIS POR SUPERFICIES

- IV.1. Catálisis en superficies.
- IV.2. Definición de catalizador.
- IV.3. Catálisis y equilibrio químico.
- IV.4. Catálisis y rapidez de reacción.
- IV.5. Acción catalítica.

- IV.5.1. Mecanismo general de la acción catalítica.
 - IV.5.1.2. La coordenada de reacción y el estado de transición (teoría del complejo activado).
 - IV.5.1.3. Diagramas de energía para una reacción no catalizada y catalizada.
 - IV.5.1.4. Curva de energía potencial para un proceso catalítico heterogéneo.
- IV.6. Reacciones Superficiales.
 - IV.6.1. Reacciones superficiales estequiométricas.
 - IV.6.2. Reacciones superficiales catalíticas.
 - IV.6.2.1 Reacciones unimoleculares y bimoleculares.
 - IV.6.3. Reacciones superficiales fotoquímicas.
- IV.7. Expresiones cinéticas.
 - IV.7.1. Mecanismos de las reacciones superficiales
 - IV.7.1.1. Modelo de Langmuir-Hinshelwood.
 - IV.7.1.2. Modelo de Eley-Rideal.
 - IV.7.2. Velocidad de la reacción catalítica global.
 - IV.7.3. La aproximación de estado estable.
 - IV.7.4. La aproximación de cuasi-equilibrio.
 - IV.7.5. Frecuencia de “Turnover”.
- IV.8. Actividad catalítica.
- IV.9. Selectividad catalítica
- IV.10. Preparación de catalizadores, desactivación y regeneración.
 - IV.10.1. Métodos y etapas de preparación de materiales catalíticos.
 - IV.10.2. Tipos de desactivación catalítica (sinterización, envenenamiento, coquización)
 - IV.10.3. Tratamientos de regeneración.
- IV.11. Clasificación de los catalizadores (Metálicos, semiconductores, aislantes).
- IV.12. Catálisis por metales y aleaciones
- IV.13. Tendencias a través de la Tabla Periódica
- IV.14. Catálisis por óxidos metálicos
- IV.15. Catálisis por iones en superficies (Catálisis Ácido-Base).
- IV.16. Casos de estudio particulares de reacciones catalíticas superficiales

Modalidades de enseñanza aprendizaje

Clase teórica: EXPOSICION ORAL POR EL PROFESOR, USO DE POWERPOINT, VIDEOS, DESARROLLO DE PROBLEMAS EN PIZARRON, PARTICIPACIÓN DE LOS ALUMNOS MEDIANTE PRESENTACIONES EN POWERPOINT Y VISITAS AL LABORATORIO DE NANOMATERIALES CATALÍTICOS

Modalidad de evaluación

Criterio de Evaluación	Ponderación	Instrumento de medición
Evaluación parcial	50%	Examen escrito
Evaluación global	20%	Examen escrito
Evaluación continua	10%	Tareas
Evaluación práctica	15%	Prototipo, memoria de cálculo y examen oral
Coevaluación	5%	Documento (listado)

Competencia a desarrollar

Aprendizaje basado en problemas, autoaprendizaje, Capacidad de análisis, síntesis y evaluación, Capacidad para la identificación y resolución de problemas, Trabajo en equipo y colaborativo, Uso de recursos informáticos, Cultura de trabajo, Responsabilidad, Puntualidad y honestidad.

Campo de aplicación profesional

El campo de aplicación profesional de esta asignatura se encuentra en los procesos de transformación química impactando en áreas tales como: Industria Química y Petroquímica, Control de la Contaminación Ambiental, Producción de Fuentes de Energía Limpias, Análisis y Diseño de Reactores Químicos Heterogéneos, Diseño de Equipos y Procesos Químicos.

3. BIBLIOGRAFÍA.

Enlistar la bibliografía básica, complementaria, y demás materiales de apoyo académico aconsejable; (material audiovisual, sitios de internet, etc.)

Título	Autor	Editorial, fecha	Año de la edición más reciente
Concepts of Modern Catalysis and Kinetics	I. Chorkendorff, J.W. Niemantsverdriet	Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2005.	2005
Cinética de las reacciones químicas, Vol.1	Keith J. Laidler	Ed. Alhambra	2011
Catalysis Science and Technology, Vols. 1-7.	J.R. Anderson and M.C. Boudart	Ed. Springer-Verlag, Berlin 1981-85.	2005
Cinética Química	Bassam Z. Shakhashiri	Limusa-Noriega	2005
Introduction to Surface Chemistry and Catalysis	G.A. Somorjai	John Wiley & Sons, Inc., New York, 1994.	2007
Cómo ocurren las	Edward I. King	Editorial Reverté	1969

reacciones químicas			
Chemical kinetics and reaction dynamics	Paul I. Houston	McGrawHill	2001

Formato basado en el Artículo 21 del Reglamento General de planes de estudios de la U.de G.

ACTUALIZACIÓN/JUNIO 2016