



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO.
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN.

DIRECCIÓN GENERAL DE
ADMINISTRACIÓN ESCOLAR
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN
DEPARTAMENTO DE PLANES
Y PROGRAMAS DE ESTUDIO

PROGRAMA DE ESTUDIO DE LA ASIGNATURA: SISTEMAS MULTIRREACCIONANTES 1056 DEL SÉPTIMO SEMESTRE
DE LA CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA
HORAS/SEMANA : 3 (3 TEÓRICAS) CRÉDITOS : 6
ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA: SECCIÓN DE QUÍMICA ANALÍTICA
CAMPO : COMPLEMENTARIO. MODALIDAD: CURSO TEÓRICO CARÁCTER DE LA ASIGNATURA. OPTATIVA
ASIGNATURA PRECEDENTE: NINGUNA ASIGNATURA CONSECUENTE NINGUNA

SISTEMAS MULTIRREACCIONANTES.
CINÉTICA Y EQUILIBRIO QUÍMICO DE LOS SISTEMAS MULTIRREACCIONANTES

INTRODUCCIÓN

EN MUCHAS SITUACIONES, UNA REACCIÓN QUÍMICA SE VE ACOMPAÑADA POR OTRAS REACCIONES QUE SE REALIZAN EN SERIE O PARALELO, CONSUMIENDO LOS PRODUCTOS DE LA REACCIÓN O COMPITIENDO POR LOS MISMOS REACTIVOS, RESPECTIVAMENTE DICHS ESQUEMAS MULTIRREACCIONANTES SE PRESENTAN CON FRECUENCIA EN APLICACIONES INDUSTRIALES DE LA QUÍMICA ORGÁNICA Y LA BIOTECNOLOGÍA. UNA GRAN CANTIDAD DE ELLAS SE LLEVAN A CABO POR MECANISMOS DE RADICALES LIBRES O DE CARBAIONES, Y EN ALGUNAS CIRCUNSTANCIAS DAN LUGAR A CINÉTICAS OSCILANTES O CAÓTICAS, CON LA PRESENCIA DE ATRACTORES EXTRAÑOS O CICLOS LÍMITE. TAL ES EL CASO DE LAS REACCIONES DE BELUSOV-SHABOTINSKY Y EL OREGONADOR CINÉTICO. EL ESTUDIO DE ESTE TIPO DE REACCIONES PERMITIRÁ AL INGENIERO QUÍMICO DISEÑAR LOS CORRESPONDIENTES REACTORES INDUSTRIALES PARA LLEVARLAS A CABO EN CONDICIONES CONTROLADAS Y ASEGURAR LA PRODUCTIVIDAD, SEGURIDAD Y ECONOMÍA DESEADAS.

EL ANÁLISIS CINÉTICO Y TERMODINÁMICO DEL EQUILIBRIO QUÍMICO DE SISTEMAS MULTIRREACCIONANTES CONSTITUYE UNO DE LOS PROBLEMAS MÁS INTERESANTES Y DE MAYOR APLICACIÓN PRÁCTICA EN LA INGENIERÍA QUÍMICA. EN ESTE CURSO SE DA

OBJETIVO GENERAL DEL CURSO.

Al finalizar el curso, los alumnos:

- Describirán y desarrollarán las bases fundamentales que permiten determinar la composición de sistemas químicos multi-reaccionantes en el equilibrio.
- Aplicarán algoritmos de computadora para calcular la composición de sistemas químicos multi-reaccionantes en el equilibrio.
- Comprenderán la utilidad y limitaciones del análisis de equilibrio de un sistema multi-reaccionante.
- Tendrán una visión general de las aplicaciones del análisis del equilibrio químico en la Ingeniería Química.
- Escribirán y aplicarán algoritmos computacionales para cálculo de la evolución de las concentraciones de reactivos y productos en sistemas multirreaccionantes

PROGRAMA :

No. de HORAS	TEMA :	No. de HORAS	TEMA:
4	<p>Unidad I. Introducción</p> <p>OBJETIVOS: Al finalizar esta unidad, los alumnos:</p> <ul style="list-style-type: none"> Comprenderán la naturaleza, importancia y su relación con la cinética, del equilibrio químico. Señalarán el alcance del equilibrio químico en términos de restricciones y aplicaciones <p>CONTENIDO: I.1 Naturaleza del Equilibrio Químico. I.2. Importancia del Análisis del Equilibrio en la Reacción Química I.3. El Problema del Cálculo I.4. Restricciones I.5. Aplicaciones del Análisis de Equilibrio Químico</p>	6	<p>Unidad II. Restricción del Sistema Cerrado y Estequiometría Química</p> <p>OBJETIVOS: Al finalizar esta unidad, los alumnos:</p> <ul style="list-style-type: none"> Utilizarán los elementos del Álgebra Lineal para hacer uso de la notación de matrices de vectores. Expresarán las ecuaciones de conservación en la notación matricial Desarrollarán la estequiometría química para un sistema cerrado y multi-componente en una forma adecuada para incorporarlo a un algoritmo de cálculo de equilibrio <p>CONTENIDO: II.1 Restricción del sistema cerrado II.2. Estequiometría química II.3. Expresión de las restricciones de composición mediante una forma estándar</p>
8	<p>Unidad III. Termodinámica Química y Condiciones de Equilibrio</p> <p>OBJETIVOS: Al finalizar esta unidad, los alumnos:</p> <ul style="list-style-type: none"> Comprenderán las condiciones para el equilibrio en términos de funciones de potencial y la descripción termodinámica de un sistema químico al introducir el potencial químico. Comprenderán las dos formulaciones de las condiciones de equilibrio: la estequiométrica y la no estequiométrica Interpretarán la formulación estequiométrica en términos de las constantes de equilibrio. Describirán las formas en que se obtiene la información que se requiere para conocer el potencial químico. <p>CONTENIDO: III.1. Funciones de potencial termodinámico y criterios de Equilibrio III.2. Descripción Termodinámica de un sistema químico III.3. Dos formulaciones de las condiciones de equilibrio III.4. La formulación estequiométrica III.5. La formulación no estequiométrica III.6. El potencial químico III.7. Implicaciones de la restricción de no negatividad. III.8. Existencia y singularidad de las soluciones. III.9. La formulación estequiométrica en términos de las constantes de equilibrio III.10. Celdas electroquímicas. III.11. Formas en que se presenta la información sobre energía libre estándar</p>	8	<p>Unidad IV. Cálculo del Equilibrio Químico para Sistemas Relativamente Simples</p> <p>OBJETIVOS: Al finalizar esta unidad, los alumnos:</p> <ul style="list-style-type: none"> Aplicarán algoritmos, de las formulaciones estequiométrica y no estequiométrica, en sistemas reales del análisis del equilibrio, para el cálculo de la composición de sistemas multi-reaccionantes relativamente simples . <p>CONTENIDO: IV.1. Sistemas multi-reaccionantes relativamente simples y su tratamiento IV.2. Formulación estequiométrica para sistemas relativamente simples IV.3. Formulación no estequiométrica para sistemas relativamente simples</p> <p>Unidad V. Cinética de reacciones complejas.</p> <ul style="list-style-type: none"> Construirán y aplicarán algoritmos computacionales para la caracterización de la cinética de reacciones complejas en sistemas multireaccionantes. <p>v.1 Oscilaciones químicas en sistemas isotérmicos cerrados. Fenomenología y Análisis Matemático. v.2 Oscilaciones termocinéticas en un sistema cerrado v.3 Bifurcaciones de Hopf. Crecimiento de pequeñas oscilaciones y relajación de las oscilaciones y excitabilidad. v.4 Reacciones Caóticas. v.5 Reacciones de Belusov-Zhabotinsky. El brucelador cinético. v.6 El Oregonator cinético. v.7 Diseño de reactores de flujo continuo para reacciones oscilantes. v.8 Formación de Patrones de difusión química. Ecuación de difusión-reacción en sistemas adimensionales. Inestabilidades guiadas por difusión. Formación de patrones cuando el estado uniforme es inestable. v.9 Reacciones heterogéneas. v.10 Oscilaciones complejas y caos químicos. </p>



DIRECCION GENERAL DE
ADMINISTRACION ESCOLAR
SUBDIRECCION DE
CERTIFICACION Y CONTROL
DOCUMENTAL
DEPARTAMENTO DE PLANES
Y PROGRAMAS DE ESTUDIO



DIRECCION GENERAL DE
ADMINISTRACION ESCOLAR
SUBDIRECCION DE
CERTIFICACION Y CONTROL
DOCUMENTAL
DIPLOMADO DE INGENIERIA
Y PROGRAMAS DE ESTUDIO

METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA

Se emplearán las siguientes técnicas didácticas:

Exposición oral del profesor

Resolución de problemas

Seminarios

Presentación de trabajos escritos sobre temas complementarios

Programas computacionales como una técnica auxiliar de la enseñanza

MÉTODO DE EVALUACIÓN

Se realizará por lo menos un examen parcial. Que debe contemplar:

1. Análisis deductivo a nivel razonable.

2. Obtención de resultados numéricos a partir de los algoritmos de computadora

REQUISITOS PARA CURSAR LA ASIGNATURA

Conocimientos básicos de : Equilibrio, Termodinámica Química y Algebra lineal

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DE QUIEN IMPARTE LA ASIGNATURA:

Profesionales de la Química

BIBLIOGRAFIA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Gray, Peter & Scott, Stephen.

Chemical Oscillations and Instabilities. Non linear Chemical Kinetics.

Clarendon Press. Oxford, England, 1994

Scott, S. K.

Chemical Chaos. Clarendon Press. Oxford, England, 1992

Gray, Peter ; Griffiths, J.F. ; Pappin, A. & Scott, S.K.

Complex Chemical Reaction Systems. Springer Verlag. Berlin, Germany, 1987

Field, R.J. & Burger, M.

Oscillations and traveling waves in chemical systems. Wiley Interscience, New York, 1985

Scott, S.K. & Griffiths, J.F. & Galwey, A.K.

Spatial Inhomogeneities and Transient Behaviour in Chemical Kinetics.

Manchester University Press, United Kingdom, 1989

Bar-Eli, K.

Nonlinear Phenomena in Chemical Chaos. Springer Verlag. Berlin, Germany, 1981.

Hilborn, Robert.

Chaos and Nonlinear Dynamics. Oxford University Press, N.Y. 2001

Berry, R. Stephen & Rice, Stuart A.

Physical and Chemical Kinetics

Oxford University Press. New York, USA, 2001

Grant, Guy H. & Richards, W. Graham

Computational Chemistry

Oxford University Press. New York, 1995

Maskill, Howard.

Mechanisms of Organic Reactions.

Oxford University Press, New York, 1996.

Cooke, D. O.

Organic Chemistry Mechanisms. Royal Chemical Society. London, England, 1979

Smith, W. R.; Missen, R. V.

Análisis del Equilibrio Químico en Reacciones Químicas. Teoría y Algoritmos

Editorial Limusa. México. 1997.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA.

Aris, R.

The Mathematical Theory of Difusión and in Permeable Catalysts.

Clarendon Press. Oxford, England, 1975

Gordus A.A

Química Analítica

Editorial Mc Graw Hill. México. 1991.

Harris, D. C.

Análisis Químico Cuantitativo

Grupo Editorial Iberoamérica. México. 1991.

Prigogine, Irya.

Introduction to nonequilibrium thermodynamics Wiley Interscience. New York, 1962

Prigogine, I. & Stengers, I. Order out to chaos

Heinemann, London England, 1983

Glansdorff, P. & Prigogine, I.

Thermodynamics of Structure, Stability and Fluctuations. Wiley Int. New York, 1971