

<b>PROGRAMA - AÑO 2021</b>			
<b>Espacio Curricular:</b>	Reacciones Heterogéneas		
<b>Carácter:</b>	Electiva	Período	Anual
<b>Carrera/s:</b>	Lic. en Cs. Básicas con Orientación en Qca. y Prof. de Qca.		
<b>Profesor Responsable:</b>	Jorge A. González		
<b>Equipo Docente:</b>	Norma Graciela Valente		
<b>Carga Horaria:</b> 70 Horas (45 Hs teóricas; 25 Hs prácticas)			
<b>Requisitos de Cursado:</b>			

### 1-EXPECTATIVAS DE LOGRO

- El objetivo principal propuesto para este proceso de enseñanza-aprendizaje, se basa en la adquisición de los conocimientos básicos de las reacciones heterogéneas.
- Adquirir los conocimientos sobre las propiedades de superficie del estado sólido.
- Alcanzar los conocimientos básicos de las reacciones heterogéneas sólido-fluido catalizadas y no catalizadas.
- Lograr los conocimientos básicos de las reacciones heterogéneas sólido-sólido.
- Interpretar los resultados experimentales y asociarlos a los diversos mecanismos de reacción, y a los principales modelos cinéticos.
- Calcular los parámetros termodinámicos en los sistemas sólido-gas no catalizados.
- Analizar e interpretar los ensayos de superficie específica y porosidad.
- Realizar e interpretar difractogramas de rayos X transformaciones de fases y sinterizado en soporte de catalizadores y en las reacciones sólido-sólido.
- Propiciar el trabajo en equipo como también la participación en actividades culturales y sociales en el ámbito universitario.

Al finalizar el curso, el estudiante deberá:

- Acreditar conceptos claros sobre las reacciones heterogéneas en sus aspectos básicos.
- Entender las diferentes propiedades físicas y químicas de los materiales en base a su ordenamiento porosidad y superficie específica.
- Interpretar los resultados experimentales en sistemas heterogéneos sólido-fluido y sólido-sólido.
- Alcanzar el grado de conocimiento que le permita aplicar los conceptos básicos de la cinética de reacciones heterogéneas.
- Adquirir habilidades en el uso de softwares para la estimación de parámetros termodinámicos y de regresiones no lineales para los principales modelos cinéticos.
- Manifestar un pensamiento lógico y crítico.

### 2-DESCRIPTORES

Introducción a los sistemas heterogéneos, adsorción física y química sobre sólidos, efecto de las diferentes variables. Isotherma de Langmuir. Caracterización fisicoquímica de

las superficies de los sólidos. Reacciones heterogéneas sólido-fluido no catalizadas; estimaciones de factibilidad termodinámica y principales modelos cinéticos. Reacciones heterogéneas catalizadas. Principales procedimientos de síntesis de catalizadores. Agente activo, inhibidores y venenos catalíticos. Expresiones de velocidad para reacciones catalíticas. Reacciones heterogéneas sólido-sólido, sinterizado, transformaciones de fases, cinética.

### 3-CONTENIDOS ANALÍTICOS

UNIDAD 1.- Adsorción física de gases sobre sólidos. Descripción de la adsorción física y química. Ecuaciones fundamentales, conceptos del número de moléculas que chocan contra una superficie y del tiempo de permanencia sobre ella. Efecto de la presión sobre la quimisorción. Influencia de la temperatura sobre el tiempo de permanencia. Expresiones analíticas de la adsorción: A) Isoterma de Langmuir; B) Ecuación de BET.

UNIDAD 2.- Breve descripción de los principales métodos de caracterización de sólidos. Difractometría de rayos X, Análisis Termogravimétricos y Térmico Diferenciales. Técnicas Espectroscópicas. Caracterización física de sólidos porosos: Superficie interna y externa. Determinación de superficie específica por el método de BET. Determinación de la porosidad por el método del helio-mercurio. Distribución de tamaños de poros: métodos por penetración de mercurio y desorción de nitrógeno. Determinación del radio medio de poros.

UNIDAD 3: Reacciones heterogéneas sólido-fluido no catalizadas. Cálculos termodinámicos sobre la factibilidad de reacción. Efecto de la temperatura; presión total del sistema y presión parcial del reactivo gaseoso. Uso de software para cálculos termodinámicos no isotérmicos e isotérmicos. Efecto del cambio de entropía. Método de minimización de energía del sistema. Cálculo de la composición de equilibrio para las diferentes condiciones experimentales.

UNIDAD 4: Cinética de Reacciones Heterogéneas no catalizadas. Características generales. Presencia de la interfase. Capa de película fluida. Efecto de la velocidad del fluido y de la Temperatura. Efecto de la concentración del fluido reactante. Determinación de los parámetros cinéticos (Energía de Activación y orden aparente de reacción). Determinación de la etapa que controla la velocidad de reacción. Reacciones de nucleación y autocatalíticas. Uso de software para regresiones no lineales con los principales modelos cinéticos. Reacciones tipo: Sólido + Gas  $\rightarrow$  Sólido; Sólido + Gas  $\rightarrow$  Sólido + Gas; Sólido  $\rightarrow$  Sólido + Gas, ejemplos.

UNIDAD 5: Reacciones heterogéneas sólido-fluido catalizadas: Adsorción química. Características diferenciales con la adsorción física. Función del catalizador. Selectividad. Soportes de catalizadores. Agentes activos. Preparación de catalizadores. Acción de promotores e inhibidores. Venenos catalíticos, diferentes tipos. Regeneración de catalizadores.

UNIDAD 6: Expresiones de velocidad para reacciones catalíticas: Expresiones de velocidad

en base a diferentes mecanismos y diferentes etapas controlantes. Análisis cuantitativo y cualitativo de los resultados.

UNIDAD 7: Reacciones Sólido-Sólido. Procesos físicos, sinterizado. Teorías del sinterizado. Transformaciones de fases, transformación amorfo-cristalina, transformación de Curie. Cambios que acompañan las transformaciones de fase. Cinética de transformaciones de fases, efecto de impurezas. Procesos químicos, tipos e importancia de las reacciones en estado sólido. Cinética de reacciones sólido-sólido.

UNIDAD 8: Reacciones Líquido-gas y Líquido-líquido. Solubilidad de gases en agua, efecto de la temperatura, efecto de la presión, efecto de los electrolitos, interacción de gases con el agua. Cinética. Solubilidad de gases en metales fundidos. Sistemas orgánico-acuosos, equilibrio entre partes, ejemplos y aplicaciones.

#### 1. TRABAJOS PRÁCTICOS

- Caracterización de sólidos. Interpretación de Difractogramas de rayos X y Análisis Térmicos de sólidos reactivos.
- Uso del Software HSC Chemistry for windows para cálculos termodinámicos de los sistemas en estudio.
- Uso del Software HSC Chemistry for windows para los cálculos de minimización de energía del sistema y las composiciones de equilibrio.
- Uso del software Polymath y Modelado para corroborar los modelos cinéticos con los datos experimentales mediante regresiones no lineales.

#### 4-BIBLIOGRAFÍA

- Levenspiel - "Chemical Reaction Engineering". Reverte, 2005.
- Smith, J.M.- "Ingeniería de la Cinética Química", Mc Graw-Hill, 6ª Ed. 1991.
- Habashi, Fathi: "Principles of Extractive Metallurgy". Vol.1, Ed. Gordon and Breach, 1980.
- Fogler, H. Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones química 4a ed. - México: Pearson, 2008.
- HSC Chemistry for Windows Software versión 5.1 with database. 2002.
- Polymath Software with Fogler, H. Scott. 2008.
- Modelado, Software para modelado de reacciones fluido-sólido. Oscar Quiroga. 1996.

### 5-METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA Y EVALUACIÓN DURANTE EL CURSADO

La enseñanza se organizará de la siguiente manera:

- Exposición de contenidos en clases teóricas haciendo mediante sistema remoto, uso de elementos audiovisuales, modelos, videos, softwares, etc.
- Presentación de los contenidos conceptuales en forma explícita.
- Conexión entre ideas previas y nuevos conceptos a través de ejemplificación, comparación, aplicación, síntesis, etc.
- Resolución de problemas en clases prácticas de aula.
- Resolución de problemas mediante el uso de software.
- Presentación de una situación experimental.
- Resolución de los datos experimentales en base a los conocimientos adquiridos.
- Organización e interpretación de los resultados.
- Elaboración de las conclusiones mediante informes por escrito.

Para realizar la evaluación del aprendizaje de los contenidos y de los procedimientos analizados, se abordaran dos aspectos:

- Que se posea y se acredite el conocimiento de las temáticas estudiadas.
- Que se logre el uso y aplicación adecuados de ese conocimiento en situaciones particulares.

En el primer caso, es suficiente una evaluación basada en un cuestionario y/o una serie de problemas por resolver, en donde se ponga de manifiesto los conocimientos y la habilidad del alumno para la resolución de este tipo de exámenes. Para el segundo caso, el docente debe permanecer junto al alumno mediante asistencia remota y realizar una observación directa, considerando una serie de indicadores básicos, previamente fijados.

Las herramientas de evaluación utilizadas serán las siguientes:

- Dos exámenes parciales, cuyos contenidos versarán sobre temas analizados previamente durante las clases de teoría y de práctica. Se contará con dos instancias recuperadoras en total, las cuales el alumno utilizará según su necesidad.

### 6- CONDICIONES DE REGULARIDAD TRAS EL CURSADO

Los alumnos que no lograron la promoción pero alcanzaron el 60% en los exámenes parciales, logran la regularización de la materia y rendirán un examen final en las fechas destinadas para tal fin de acuerdo a la normativa de las materias curriculares.

### 7- SISTEMA DE APROBACIÓN Y/O PROMOCIÓN DEL ESPACIO CURRICULAR

La materia estará aprobada por promoción luego de cumplir lo siguiente:

- Asistencia obligatoria al 80 % de las clases teórico-prácticas.
- Aprobación del 100 % de los exámenes parciales con calificación igual o superior al 75%.

Cabe destacar que las recuperaciones podrán también ser usadas para alcanzar la promoción.

<b>PROMOCIONABLE</b>	SI	X	NO	
----------------------	----	---	----	--

**FIRMA Y ACLARACIÓN  
DEL RESPONSABLE DEL ESPACIO CURRICULAR**