

### Presentación

El objetivo general de la asignatura es que el estudiante de postgrado sea capaz de seleccionar, diseñar y modelar un proceso de reacción a alta presión, con un disolvente en condiciones subcríticas o supercríticas.

### Programa Básico

### Objetivos

- \* Diseñar un sistema de medida de cinéticas homogéneas o heterogéneas a alta presión
- \* Seleccionar el disolvente del proceso en función de criterios de sostenibilidad
- \* Determinar curvas de tiempo de residencia
- \* Modelar procesos de reacción a alta presión
- \* Determinar de los parámetros cinéticos y de transferencia de materia en procesos multifásicos

### Programa de Teoría

#### Tema 1. Introducción a los Fluidos Supercríticos

Objetivos del curso. Fluidos supercríticos como medio de reacción. Antecedentes. FSC como reactivos. FSC como catalizadores. FSC como disolventes. Aplicaciones Industriales. Bibliografía general.

#### Tema 2. Cinética de las reacciones químicas a presión

Reacciones homogéneas y heterogéneas. Velocidad específica de reacción. Obtención de datos cinéticos. Estimación de parámetros.

#### Tema 3. Curvas de Distribución de Tiempos de Residencia

Flujo ideal y flujo real. Medición de curvas de tiempo de residencia a alta presión. Modelos RTD. Ajuste de los modelos RTD. Predicción RTD por CFD.

#### Tema 4. Selección del disolvente de reacción

Química e Ingeniería Verde. Sostenibilidad. Tipos de disolventes. Criterios de selección.

#### Tema 5. Reacción en una fase a alta presión

Oxidación en agua supercrítica para el tratamiento de aguas residuales industriales. Balances de materia y energía. Parámetros de diseño del reactor. Modelo del sistema. Corrosión. Aprovechamiento energético. Polimerización de etileno. Mecanismo de reacción. Catalizadores. Tipos de reactores. Modelo del sistema.

#### Tema 6. Reacción multifásica a alta presión

Oxidación húmeda para el tratamiento de aguas residuales industriales. Balances de materia y energía. Tipos de reactores. Parámetros de diseño del reactor. Catalizadores. Modelo del sistema. Otros casos de estudio: Hidrogenación de compuestos orgánicos, producción de agua oxigenada, despolimerización catalítica, reacciones enzimáticas.

#### Tema 7. Reacciones con precipitación de sólidos en medio supercrítico

Procesos convencionales. Síntesis hidrotermal. Síntesis en CO<sub>2</sub>-sc. Otros disolventes. Nanofluidos.

## Programa Práctico

---

1. Búsqueda de datos cinéticos
  2. Simulación de procesos con reacción en Hoja de Cálculo
  3. Visita a instalaciones de alta presión con reacción
  4. Ajuste de datos cinéticos
  5. Ajuste de curvas RTD
  6. Simulación de un proceso de reacción multifásico a alta presión
- 

## Evaluación

---

En la asignatura se realizarán las siguientes evaluaciones:

### Evaluación diagnóstica

Al comienzo del curso, es necesario analizar las condiciones y posibilidades de aprendizaje y/o de ejecución de las tareas del curso.

Cada curso es diferente y es preciso identificar la realidad del grupo de alumnos que participarán en la asignatura, comparándola con la realidad pretendida en los objetivos y los requisitos o condiciones que su logro demanda. Sirve también para detectar necesidades concretas de aprendizaje (p.e. sistema que uno de los estudiantes utilizará en su trabajo fin de máster o tesis y que puede servir de ejemplo para todos).

Esta evaluación se realizará en tres vertientes:

- Realización de una encuesta simple a todos los alumnos
- Entrevista con los alumnos en clase
- Tutorías iniciales

### Evaluación sumativa

Se utilizará como medio de calificación de la asignatura.

En la asignatura los estudiantes deberán realizar un trabajo planteado de forma individual o en grupo (lo seleccionará/n el/los profesor/es de la asignatura en cada caso) que representará el 100% de la puntuación.

En el trabajo se evaluarán:

- Presentación: brevedad, claridad, formato y corrección en la escritura (10%)
- Consecución de los objetivos planteados (60%)
- Creatividad e innovación (20%)
- Extensiones planteadas y resueltas por el estudiante (10%)

Se tendrá en cuenta asimismo:

- Asistencia a las clases y seminarios
  - Participación activa durante las clases y seminarios
- 

## Bibliografía

---