



PLAN DE ESTUDIOS 2002

ASIGNATURA: **INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS II**
CÓDIGO **Q814**
ESPECIALIDAD/ES: **Ingeniería Química**

Contenidos Analíticos:

Unidad I: CATALIZADORES SOLIDOS

Revisión del concepto de acción catalítica. Características de los catalizadores sólidos. Ventajas de la catálisis heterogénea. Utilización de catalizadores porosos. Clasificación de los catalizadores sólidos, su correlación con el tipo de reacciones químicas que catalizan y con la capacidad de conducción eléctrica: metales, óxidos de elementos de transición, ácidos. Constituyentes de catalizadores industriales. Técnicas de preparación de materiales catalíticos, catalizadores "másicos" y catalizadores "soportados". Promotores. Caracterización textural de materiales porosos (propiedades físicas fundamentales: porosidad, área específica, distribución de tamaño de poros, volumen específico de poros). Adsorción física. Agentes que afectan la actividad catalítica, vida útil de catalizadores. Conceptos básicos de desactivación y regeneración.

Unidad II: FENÓMENOS DE SUPERFICIE

Procesos de adsorción química sobre el sólido. Isotermas de Langmuir y otros tipos de isotermas. Procesos cinéticos que gobiernan la velocidad de reacción química global entre un fluido y un sólido poroso. Difusión en medios porosos. Tipos de control del proceso difusivo. Adsorción química y reacción superficial: Mecanismos de reacción. Intermediarios. Expresiones de Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson para la expresión cinética global.

Unidad III: ACOPLAMIENTO DE FENÓMENOS DE TRANSFERENCIA DE MASA Y CALOR Y REACCIÓN CATALÍTICA

Descripción fenomenológica. Expresión y dependencia de la velocidad de reacción efectiva. Factor de efectividad interno. Falseamiento de ordenes de reacción y energías de activación por efectos difusionales. El factor de efectividad generalizado, concepción y aplicabilidad. El transporte externo. Análisis de etapas controlantes. Evaluación del factor del factor de efectividad global. Fenómenos de Histéresis y multiplicidad de estados estacionarios. Criterios para desprestigiar efectos internos y/o externos. Determinación de parámetros cinéticos para reacciones catalizadas por sólidos.

Unidad IV: REACTORES CATALITICOS

Descripción y clasificación de reactores catalíticos de lecho fijo para una única fase



fluida. Aplicación de la hipótesis de flujo pistón. Modelos unidimensionales para reactores catalíticos de lecho fijo.: ecuaciones de balance de materia y energía y expresiones para la pérdida de carga. Coeficientes globales de transferencia de calor en lechos fijos. Análisis y diseño. Descripción de características y operación de otros tipos de reactores catalíticos.

Unidad V: FLUJO NO IDEAL EN REACTORES QUÍMICOS

Revisión de las hipótesis ideales de flujo. Causas del apartamiento de dichas hipótesis en sistemas reales: perfiles radiales de velocidad, variaciones axiales de velocidad (dispersión axial), efectos térmicos, cortocircuitos en sistemas tipo tanque agitado. Estrategia para abordar el estudio del problema de flujo no-ideal. Distribución de tiempos de residencia (DTR). Función densidad de tiempos de residencia. Función acumulativa de distribución de tiempos de residencia. Determinación experimental de la DTR: técnicas de estímulo-respuesta. DTR para flujos ideales. Ensayos con trazadores en lechos de pastillas porosas. Uso directo de la DTR: El Modelo de Segregación. Su aplicación a sistemas heterogéneos. El modelo de Dispersión Axial. Fenómenos factibles de ser representados por el modelo de dispersión axial. Correlación del coeficiente de dispersión axial. Estimación de la dispersión axial intrínseca en lechos fijos. Efecto sobre las reacciones químicas. Validez del modelo de flujo pistón y del modelo de dispersión axial. El modelo de Tanques Agitado en Serie. Comparación y equivalencia de Modelos no ideales.

Unidad VI: REACCIONES GAS-LÍQUIDO.

Descripción fenomenológica de reacciones gas-líquido. El Modelo de las dos Películas para representar el transporte de materia y energía entre las fases. Acoplamiento de transferencia de masa y reacción química. Balances de materia y energía según el modelo de la película. Dependencia de la velocidad de transferencia global de materia con parámetros del sistema: segundo número de Damckohler, retención líquida, relación de velocidades de difusión de las especies en fase líquida, órdenes de reacción. Enfoque pseudo-físico. Factor de Reacción: Soluciones aproximadas, analíticas para determinadas regiones y visualización gráfica. Formulación aproximada de van Kreveleen. Perfiles de composición. Tipos de control del proceso de transferencia global. Otros modelos fluidodinámicos: el modelo de la penetración, de la película-penetración y de la renovación superficial. Dependencia del coeficiente de transferencia de materia con la difusividad de la especie en función del modelo adoptado. Descripción de potenciales ventajas y o desventajas con relación al modelo de la película. Determinación de coeficientes de transferencia de materia en fase gaseosa, en fase líquida y del área interfacial para sistemas gas-líquido. Ejemplos.

Unidad VII: REACTORES GAS-LÍQUIDO.

Tipos de contactores Gas-líquido: Columnas de burbujeo. Columnas de platos. Columnas rellenas. Diseño y operación de columnas rellenas. Tipos de relleno. Correlaciones para coeficientes de transferencia. Área específica. Distribuidores de gas. Modelado y cálculo de columnas rellenas, tanques agitados y columnas de burbujeo. Ventajas de cada equipo y dificultades operativas. Casos y ejemplos de utilización. Lavadores de gases. "Scrubbers" Venturi y atomizadores. Equipos con agitación mecánica: Tanques agitados con burbujeo. Diseño y operación.



Correlaciones para los coeficientes de transferencia y propiedades. Ventajas de su utilización. Tanques Agitados con burbujeo, operación semi-continua (sin extracción de líquido). Comparación de operaciones, criterios de selección del equipo. Ejemplos.

Unidad VIII: REACCIONES GAS-SÓLIDO (NO REACTIVO).

Descripción fenomenológica de la reacción entre componentes en fase fluida y en fase sólida. Procesos cinéticos que gobiernan la velocidad global de consumo del componente sólido. Etapas del fenómeno: transferencia de materia en la película que rodea al sólido, difusión en cenizas y reacción química. Modelos para representar cuantitativamente el fenómeno: El modelo del Consumo Asintótico, Modelo de la Conversión Progresiva y Modelo del Frente Móvil (o del Núcleo sin reaccionar). El caso real. Expresiones de la velocidad de consumo efectivo y relaciones conversión-tiempo a partir del Modelo del Frente Móvil. Regímenes y tipos de control del proceso global. Sólido de tamaño constante y caso de sólido que reacciona dando productos no adherentes. Determinación experimental de etapas controlantes. Propiedades efectivas y parámetros.

Unidad IX: REACTORES GAS-SÓLIDO (NO REACTIVO)

Tipos de reactores Gas-Sólido reactivo. Operación discontinua: reactores de lecho fijo. Operación Continua: reactores de lecho móvil y reactores de lecho fluidizado. Conceptos básicos para el tratamiento de sistemas fluidizados. Fluidodinámica del lecho. Modelos de flujo aplicables a cada caso. Modelización de reactores de lecho fijo, móvil y fluidizado: formulación de balances de materia y energía. Análisis y diseño de reactores para el caso de tamaños de sólido uniforme y no uniforme. Referencia descriptiva a otros tipos de reactores. Cálculo de la producción. Análisis comparativo de las operaciones. Ventajas y desventajas de cada equipo.

BIBLIOGRAFÍA GENERAL:

- Levenspiel, O., "Ingeniería de las Reacciones Químicas", Segunda Edición, Editorial Reverté, 1988 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química)
- Farina, I. H., Ferretti, O. A., Barreto, G. F., "Introducción al Diseño de Reactores Químicos", EUDEBA, 1986 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química)
- Levenspiel, O., "The Chemical Reactor Omnibook", OSU Books Dist., ISBN 0-88246-170-2; existe versión traducida al castellano (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química).
- Fogler H. S., "Elements of Chemical Reaction Engineering", Second Edition, Prentice Hall, 2000 (Biblioteca del Depto de Ingeniería Química).
- Smith, J. M., "Ingeniería de la Cinética Química", CECSA, 3ª. Ed., 1986 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química).
- Santamaría, J. M., Herguido J., Menéndez M. A., Monzón A., "Ingeniería de Reactores", Editorial Síntesis, 1999.
- Danckwerts, P. V., "Gas-liquid reactions", Mc Graw-Hill, 1970 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química)
- Froment, G. F. and K. Bischoff., "Chemical Reactor Analysis and Design", Second Edition, Ed. John Wiley & Sons., 1990 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química) .



Universidad Nacional de La Plata
FACULTAD DE INGENIERÍA