

Ingeniería de las Reacciones Químicas

Datos administrativos de la asignatura

Departamento:	Ingeniería Química		
Asignatura:	Ingeniería de las Reacciones Químicas		
Carrera:	Ingeniería Química (Ord. N° 1875)		
Nivel de la carrera	Cuarto Año	Duración	Anual
Bloque curricular:	Tecnologías Aplicadas		
Cantidad de comisiones:	1 (una) ^{tv}		
Carga horaria presencial semanal:	3,75 h reloj	Carga Horaria total:	120 h reloj
Carga horaria no presencial semanal	-	% horas no presenciales	-

Contenidos mínimos de acuerdo con el Diseño Curricular.

- Diseño, simulación e intensificación de equipos de operación continua y discontinua con reacción química, isotérmicos y no isotérmicos.
- Cinética homogénea y heterogénea.
- Reactores reales.
- Mantenimiento de estas operaciones.

Programa analítico. Unidades temáticas

UNIDAD TEMÁTICA 1: CINÉTICA EN SISTEMAS HOMOGÉNEOS.

Cinética en sistemas homogéneos. Introducción. Objetos de la cinética química. Conceptos estequiométricos básicos. Definición de velocidad de reacción. Velocidad de reacción en sistemas de volumen constante y de volumen variable. Grado de avance y conversión. Variables que afectan la velocidad de reacción. Constante de velocidad de reacción. Nociones sobre mecanismos de reacción. Reacciones simple y múltiple. Reacciones elemental y no elemental. Nociones sobre mecanismos de reacción. Reacciones en serie y en paralelo. Selectividad. Reacciones reversibles. Caracterización matemática de reacciones simples (orden cero, uno, dos, tres y fraccionario). Reacciones autocatalíticas. Modelos experimentales para la determinación de los parámetros cinéticos. Técnicas para la interpretación de datos. Método integral y diferencial. Análisis de ^{ta} ecuación completa. Análisis parcial de la ecuación de velocidad. Método de aislamiento. Método de las velocidades iniciales. Efecto de la temperatura sobre la velocidad de reacción. Expresión de Arrhenius. Cálculo de la energía de activación. Teorías moleculares de la cinética de reacción química. Teoría de la colisión. Teoría del estado de transición (complejo activado).

DIRECCIÓN ACADÉMICA
ES COPIA FIEL DEL ORIGINAL



MARIA EUGENIA LAVORATTO
DIRECTORA
DIRECCIÓN ACADÉMICA
U.T.N. F.R.L.P.

Ing. Mario Daniel FLORES
Director Bto: Ing. Química

UNIDAD TEMÁTICA 2: REACCIONES SOLIDO-FLUIDO NO CATALÍTICAS.

Reacciones fluido-sólido no catalíticas. Selección de un modelo. Velocidad de reacción para partículas que no cambian de tamaño (control en película externa, control en cenizas, control químico). Velocidad de reacción para partículas que disminuyen de tamaño (control químico, control de película gaseosa). Combinación de resistencias. Determinación de la etapa controlante.

UNIDAD TEMÁTICA 3: REACCIONES HETEROGÉNEAS FLUIDO-FLUIDO.

Reacciones heterogéneas fluido-fluido. Consideraciones generales. Ecuación de velocidad. Control de transferencia de masa. Control químico. Combinación de resistencias. Casos límite. Factor de reacción. Modelo de Van Krevelen para distintos órdenes y pseudo órdenes. Control pelicular en fase fluida. Cálculo de coeficientes de película de transferencia de masa. Correlaciones. Torres de adsorción con reacción química.

UNIDAD TEMÁTICA 4: REACCIONES CATALIZADAS POR SÓLIDOS.

Reacciones catalizadas por sólidos. Propiedades de los catalizadores. Clasificación. Características. Componentes. Preparación. Promotores e inhibidores. Desactivación. Criterios de selección de un catalizador. Adsorción física y adsorción química. Ecuación de velocidad. Modelo de Hougen-Watson. Factor de eficiencia. Módulo de Thiele. Efecto de la temperatura. Revisión de propiedades físicas. Cinética catalítica. Adsorción en superficies sólidas. Determinación del área superficial. Tipos de adsorción. Modelo de Langmuir. Ecuación de BET. Volumen de vacíos y densidad del sólido. Tamaño y distribución de poros.

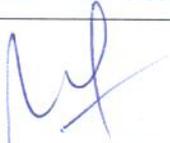
UNIDAD TEMÁTICA 5: REACTORES QUÍMICOS.

Sistema de un solo reactor ideal. Definición y clasificación de los reactores químicos. Reactores tanque y tubulares. Diseño de reactores. Reactores de lecho fijo. Pérdida de carga, fórmula de Ergun. Aplicación a reactores industriales tales como: Reformado de naftas. Objetivos. Ecuaciones generales de diseño. Modelo de flujo ideal, mezclado ideal y mezclado nulo. Simplificación de las ecuaciones de diseño: tanque discontinuo idealmente agitado y flujo pistón ideal. Conversión. Reactores semicontinuos. Comparación de tamaño de reactores/gráficos. Adimensionalización de la ecuación de materia. Número de Damkholer. Relación de tamaño de reactores para cinética arbitraria. Método gráfico. Mantenimiento de reactores.

UNIDAD TEMÁTICA 6: SISTEMAS DE REACTORES IDEALES.

Sistema de reactores ideales múltiples. Reacciones ideales conectados en serie y en paralelo. Reacciones de primer orden. Reacciones de segundo orden. Gráficos. Tanques continuos idealmente agitados conectados en serie de diferente tamaño. Determinación del sistema óptimo




Ing. Mario Daniel FLORES
Director Dto. Ing. Química

para una conversión dada. Método gráfico. Disposición más adecuada de un sistema de reactores ideales. Mantenimiento de reactores.

UNIDAD TEMÁTICA 7: REACTOR CON RECIRCULACIÓN.

Reactor con recirculación. Flujo pistón ideal con recirculación sin separación. Relación de reciclo. Relación entre conversión de entrada y de salida. Método gráfico.

UNIDAD TEMÁTICA 8: REACTORES NO ISOTÉRMICOS.

Reactores no isotérmicos. Planteo de la ecuación de energía, reactores adiabáticos. Relación entre temperatura y conversión. Autotermia en reactores flujo pistón y tanque continuo idealmente agitado. Método iterativo. Secuencia de cálculo. Aplicación a diferentes. Mantenimiento de reactores.

UNIDAD TEMÁTICA 9: DISEÑO DE REACTORES NO IDEALES.

Diseño de reactores no ideales. Distribución de tiempos de residencia. Curva I y E. Métodos experimentales estímulo-respuesta. Pulso-escalón. Curvas C y F. Relación entre las distintas curvas. Respuesta estímulo para sistemas de flujo ideales y no ideales. Parámetros de caracterización de distribuciones. Media y varianza. Utilización de la información de la distribución. Sistemas lineales y no lineales, con y sin modelo de flujo. Cálculo de la concentración de salida para sistemas lineales. Modelo de flujo no ideal. Modelo de flujo segregado. Modelo de dispersión. Modelos combinados de Charlotte y Cloutier y de tanque continuo en serie. Mantenimiento de reactores.

UNIDAD TEMÁTICA 10: REACTORES DE LECHO FIJO Y FLUIDIZADO.

Transporte externo en reacciones heterogéneas. Reactores de lecho fijo. Pérdida de carga. Reactores adiabáticos de lecho de relleno por etapas. Reactores de lecho fluidificado de catalizador sólido fino, contacto en lechos de burbujas rápidas o lechos de partículas finas. Modelo de Davidson-Harrison. Aplicación a reactores industriales. Mantenimiento de reactores.

TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO

- Trabajo Práctico de Laboratorio N°1: Determinación de la Constante de Equilibrio de una Reacción Química. Determinación de su Calor de Reacción.
- Trabajo Práctico de Laboratorio N° 2: Reactores Ideales. Obtención de Ecuación Cinética.
- Trabajo Práctico de Laboratorio N° 3: Reactores Reales. Cálculo del Tiempo de



Ing. Mario Daniel FLORES
Director Dto. Ing. Química

- Trabajo Práctico N°2: Reactores de equilibrio
- Trabajo Práctico N°3: Reactores flujo pistón

Referencias bibliográficas

Recomendada

- Fogler, S. (2008). *Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas*. Pearson.
- Levenspiel, O. (2015). *Ingeniería de las Reacciones Químicas*. Limusa.
- Levenspiel, O. (2011). *El Omnilibro de los Reactores Químicos*. Reverté.
- López, R. R., Pérez, I. H. (2014). *Diseño de Reactores Homogéneos*. Instituto Politécnico Nacional.
- Chorkendorff, I., Niemantsverdriet, J. W. (2017). *Concepts of Modern Catalysis and Kinetics*. Wiley & Sons.
- Nørskov, J. et al. (2014). *Fundamental Concepts in Heterogeneous Catalysis*. Wiley.
- Farina, A. et al. (1997). *Introducción al Diseño de Reactores Químicos*. Nueva Librería.

Complementaria

- Arce y A. (2011). *Modeling and Simulation of Catalytic Reactors for Petroleum Refining*. Wiley.
- Smith, J. (1991). *Ingeniería de la Cinética Química*. CECSA.
- Santamaría, J. (1999). *Ingeniería de Reactores*. Síntesis.



Ing. Mario Daniel FLORES
Director Dto. Ing. Química