Ministerio de Cultura y Educación **(Programa del año 2016)**
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Quimica
Area: Tecnología Química y Biotecnología

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
DISEÑO DE REACTORES HOMOGENEOS	LIC. EN QUIMICA	3/11	2016	1° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ARRUA, LUIS ALBERTO	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
BARROSO, MARIANA NOELIA	Prof. Colaborador	P.Adj Semi	20 Hs
GORRIZ, OSVALDO FRANCISCO	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	**Teóricas**	**Prácticas de Aula**	**Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.**	**Total**
Hs	4 Hs	5 Hs	1 Hs	10 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	1º Cuatrimestre

Duración			
Desde	**Hasta**	**Cantidad de Semanas**	**Cantidad de Horas**
14/03/2016	24/06/2016	15	150

IV - Fundamentación

El curso “Diseño de reactores Homogéneos”, para el Plan de Estudios 3/11 de la Lic. en Química, se desarrolla durante el primer cuatrimestre de quinto año de la carrera, e incorpora el concepto de reactor químico como el recinto dentro del cual se llevan a cabo la gran variedad de reacciones químicas vistas por los estudiantes hasta este nivel de sus carreras, atendiendo a los distintos tipos generales de geometrías (reactores tanques y tubulares) y condiciones de operación (isotérmica y no isotérmica, adiabática y no adiabática). Esta introducción al análisis y diseño de reactores químicos se realiza en este curso mediante la definición de condiciones ideales de mezclado (mezcla completa y flujo en pistón) y el desarrollo para estos sistemas de los respectivos balances de materia y energía. También se desarrollan estudios comparativos entre los distintos sistemas y las condiciones de operación para reacciones simples y complejas. En una segunda parte del curso se introduce el concepto de reactores reales y se aporta la metodología para el estudio de los mismos, cuantificando su alejamiento del comportamiento ideal mediante el uso de los modelos de tanques en serie y de flujo pistón con dispersión. Finalmente, se dan los elementos que permiten estimar el efecto del alejamiento de la idealidad sobre el desempeño del reactor.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Los objetivos generales del curso son:
- Estudiar el comportamiento de los reactores químicos homogéneos ideales, haciendo uso de los conceptos aportados por la termodinámica, la cinética química, la mecánica de fluidos y los fenómenos de transporte, tendiendo a desarrollar en los alumnos diversas áreas del conocimiento de utilidad práctica, a saber:
- Habilidad para plantear, suponer y simplificar problemas.
- Capacidad para hacer los análisis críticos de las soluciones presentadas en la literatura.

- Razonar de acuerdo a los fenómenos que se desarrollan.
- Conocer los métodos de caracterización de los reactores reales y la utilización de los modelos que interpretan el comportamiento de los reactores químicos con mezclado no ideal.
- Realizar los cálculos que permitan predecir los valores de conversión en los reactores reales.

VI - Contenidos

TEMA 1: INTRODUCCIÓN AL DISEÑO DE REACTORES

Reactores de mezcla completa, concepto. Reactores discontinuos isotérmicos. Balance de materia y ecuación de diseño. Representación gráfica. Reactores a volumen constante: diversos tipos de reacciones. Reactores a volumen variable. Reactores discontinuos no isotérmicos. Balance de energía. Acoplamiento de las ecuaciones de balance. Estudio de la isoterma y de la anisotermia en régimen adiabático y anadiabático.

TEMA 2: REACTORES DE MEZCLA COMPLETA CONTINUOS Y SEMICONTINUOS

Reactores de mezcla completa en estado estacionario. Balance de materia y ecuación de diseño. Tiempo espacial y velocidad espacial. Representación gráfica. Influencia de la relación de reactivos. Reactores de mezcla completa continuos en serie en estado estacionario. Reactores de mezcla completa semicontinuos. Reactores de mezcla completa no isotérmicos. Balance de energía. Acoplamiento de las ecuaciones de balance. Estudio de la isotermia y de la anisotermia en régimen adiabático y anadiabático.

TEMA 3: REACTORES DE FLUJO EN PISTÓN

Concepto de flujo en pistón. Balance de materia y ecuación de diseño. Representación gráfica. Sistemas de densidad constante y densidad variable. Reactores de flujo en pistón no isotérmicos. Balance de energía. Acoplamiento de las ecuaciones de balance. Operaciones isotérmicas y anisotérmicas en régimen adiabático y anadiabático. Reactores de flujo en pistón isotérmicos con recirculación. Balance de materia y ecuación de diseño. Representación gráfica.

TEMA 4: PROCEDIMIENTO GRAFICO GENERAL DE DISEÑO

Relaciones entre composición, temperatura y velocidad de reacción, para reacciones irreversibles, reversibles exotérmicas y reversibles endotérmicas. Metodología general y aplicación a distintos tipos de reactores: flujo en pistón con y sin reciclo, mezcla completa en estado estacionario y opciones en serie. Progresión óptima de temperatura. Efectos caloríficos: operaciones adiabáticas y no adiabáticas. Problema especial de reacciones exotérmicas en reactores de mezcla completa.

TEMA 5: ESTUDIO COMPARATIVO CON REACCIONES SIMPLES

Reactor discontinuo vs. reactor de flujo en pistón. Reactor de mezcla completa en estado estacionario vs. reactor de flujo en pistón. Reactor de mezcla completa en serie vs. reactor de flujo en pistón. Reactor de flujo en pistón con recirculación vs. reactor de flujo en pistón sin recirculación.

TEMA 6: ESTUDIO COMPARATIVO CON REACCIONES COMPLEJAS

Sistemas isotérmicos: reacciones en serie, paralelo y serie-paralelo. Estudio cualitativo y cuantitativo de la distribución de productos en reactores de flujo en pistón y mezcla completa, discontinuo y continuo en estado estacionario. Efecto de la temperatura sobre la distribución de productos para reacciones en paralelo, en serie y en serie-paralelo. Distribución de productos en función del tiempo para distintas situaciones de reacciones reversibles en serie y en paralelo.

TEMA 7: EFECTO DE MEZCLADO NO IDEAL EN REACTORES QUÍMICOS

Distribución de tiempos de residencia de un fluido a la salida de un recipiente. Curva E(t). Métodos experimentales estímulo-respuesta. Estímulo escalón: curva F(t). Estímulo impulso: curva C(t). Relación entre las curvas E(t), C(t) y F(t). Momentos estadísticos de una distribución. Momentos absolutos y momentos centrales. Revisión de la respuesta para reactores con mezclado ideal. Tiempo adimensional.

TEMA 8: MODELOS QUE INTERPRETAN EL COMPORTAMIENTO DE REACTORES QUÍMICOS CON MEZCLADO NO IDEAL

Modelo de dispersión: deducción de la ecuación diferencial que lo representa y sus soluciones para grados de dispersión pequeño y grande. Relación entre los parámetros característicos de la curva C(tita) del recipiente y el módulo de dispersión. Consideraciones sobre recipientes cerrados y abiertos. Modelos de tanques en serie: desarrollo en base al concepto de integral de convolución. Relación entre los parámetros característicos de la curva C(tita) del recipiente y el número de tanques, N.

Consideraciones sobre flujo segregado. Uso en el cálculo de conversión. Aplicación del modelo de dispersión a reacciones irreversibles de orden n. Aplicación del modelo de tanques en serie.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA:
- Aproximadamente 80 horas de resolución de problemas sobre los distintos tópicos fundamentales del programa de la asignatura.

TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO:
- Aproximadamente 20 horas de tareas de laboratorio y procesamiento de información experimental en los siguientes temas:
1. Reactor de Mezcla Completa Discontinuo. Sistema isotérmico, hidrólisis de anhídrido acético, (4 horas de duración).
2. Reactor de Mezcla Completa Continuo. Sistema isotérmico, hidrólisis de anhídrido acético, (4 horas de duración)
3. Reactor de Flujo en Pistón. Sistema isotérmico, hidrólisis de anhídrido acético, (4 horas de duración).
4. Reactores Reales. Estudio de la desviación del comportamiento ideal en un reactor tubular, (3 horas de duración).
5. Reactores Reales. Estudio de la desviación del comportamiento ideal en un reactor tanque agitado, (3 horas de duración).

NORMAS GENERALES DE SEGURIDAD
Condiciones de trabajo: Prevención. Normas de seguridad. Cuidado y limpieza del lugar de trabajo. Señalizaciones. Código de colores. Hábitos de trabajo: Ubicación del material de seguridad como extintores, duchas de seguridad, lavaojos, botiquín, etc. Etiquetas y fichas de datos de seguridad de los productos. Campanas.
Protección personal: Normas básicas. Criterio y grados de protección. Elementos de protección personal. Guantes de seguridad. Guardapolvos. Gafas de seguridad.
Seguridad en el laboratorio: Seguridad en la manipulación de materiales y/o sustancias. Derrames. Tratamiento de polvos, gases y humos. Higiene y condiciones generales de trabajo. Manipulación de material de vidrio y productos químicos. Prevención de incendios. Disposición y eliminación de residuos. Mantenimiento del laboratorio.
Acciones a seguir en caso de emergencia: fuego en laboratorio; quemaduras; cortes; derrames de productos químicos sobre la piel; contacto de productos químicos en los ojos; inhalación de productos químicos; actuación en caso de ingestión de productos químicos.

NORMAS DE TRABAJO
1. Antes comenzar el trabajo en el laboratorio debe familiarizarse con los elementos de seguridad disponibles y seguir, rigurosamente, las indicaciones del profesor a cargo de la realización del trabajo práctico.
2. Utilizar antiparras de seguridad para evitar salpicaduras.
3. Se debe usar guardapolvo en el laboratorio. No llevar ropa corta.
4. Es recomendable utilizar guantes, sobre todo cuando se utilizan sustancias corrosivas o tóxicas.
5. Evitar que las mangas, puños o pulseras estén cerca de las llamas o de la máquina eléctrica en funcionamiento.
6. No comer ni beber en el laboratorio.
7. Lavarse las manos después de cada experimento y antes de salir del laboratorio.
8. No fumar en el laboratorio por razones higiénicas y de seguridad.
9. Cerrar herméticamente los frascos de productos químicos después de utilizarlos.
10. El área de trabajo tiene que mantenerse siempre limpia y ordenada, sin libros, abrigos, bolsas, productos químicos vertidos, exceso de frascos de productos químicos, equipos.

VIII - Regimen de Aprobación

- Régimen para alumnos regulares, libres y vocacionales, según la Ordenanza de Régimen Académico Nº 13/03 y Nº 32/14 C.S :
a) EL CURSO SERÁ APROBADO POR EL RÉGIMEN DE EXAMEN FINAL ORAL.
b) LA CONDICIÓN DE ALUMNO REGULAR SE AJUSTA A LO ESTABLECIDO EN EL ARTÍCULO 24 DE LA ORDENANZA DE RÉGIMEN ACADÉMICO Nº 13/03 y Nº 32/14 C.S.
c) LOS TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA SERÁN APROBADOS CON LA RESOLUCIÓN DE LA TOTALIDAD DE LOS PROBLEMAS INDICADOS PARA CADA UNA DE LAS CLASES PRÁCTICAS DE AULA.
d) LA APROBACIÓN DE LOS TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO REQUIERE:

d.1) Aprobación de un cuestionario previo al trabajo práctico.
d.2) Ejecución del trabajo práctico.
d.3) Presentación de un informe escrito con los resultados experimentales, el tratamiento correspondiente de los datos y las conclusiones obtenidas.
e) LAS EVALUACIONES PARCIALES VERSARÁN SOBRE LOS TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA CORRESPONDIENTES A CADA UNO DE LOS TEMAS DEL CURSO Y SE APROBARÁN CON UNA CALIFICACIÓN DE SIETE (7) PUNTOS SOBRE UN MÁXIMO DE 10 (DIEZ). SE ESTABLECEN TRES EVALUACIONES PARCIALES Y SEIS RECUPERACIONES: DOS RECUPERACIONES POR CADA PARCIAL.
f) LOS ALUMNOS QUE DESEEN RENDIR LA ASIGNATURA EN CALIDAD DE LIBRES, DEBERÁN APROBAR UN EXAMEN ESCRITO QUE INCLUYA TODOS LOS TEMAS DE LOS TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA, REALIZAR UN TRABAJO PRÁCTICO DE LABORATORIO (SELECCIONADO POR SORTEO) Y FINALMENTE RENDIR EL EXAMEN FINAL ORAL.

IX - Bibliografía Básica

[1] "INGENIERIA DE LAS REACCIONES QUIMICAS", Octave Levenspiel; Editorial Reverté; Barcelona (2001).
[2] "AICHEMI, MODULAR INTRUCTIONS", Serie E, Kinetics; American Institute of Chemical Engineering (1981).
[3] "FUNDAMENTOS DEL DISEÑO DE REACTORES", R.E. Cunningham y J.L. Lombardi. Editorial Eudeba, Tomos I y II (1979).

X - Bibliografia Complementaria

[1] - ELEMENTS OF CHEMICAL REACTION ENGINEERING - H. Scott Fogler; P.T.R. Prentice Hall, Inc. (1992).
[2] - INGENIERIA DE LA CINETICA QUIMICA - J.M. Smith. Compañía Editorial Continental S.A. 1977.
[3] - INTRODUCTION TO CHEMICAL ENGINEERING THERMODYNAMICS - J.M. Smith and H.C. van Ness 2th.Edition Mc Graw-Hill Book Company Inc. 1959.
[4] - CHEMICAL REACTOR ANALYSIS AND DESIGN. Gilbert Froment and Kenneth B. Bischoff, Editorial John Wiley and Sons (1979).
[5] - AN INTRODUCTION TO CHEMICAL ENGINEERING KINETICS AND REACTOR DESIGN - Charles G. Hill Jr. Editorial John Wiley and Sons (1977).
[6] - INTRODUCCION AL DISEÑO DE REACTORES QUIMICOS - J.H. Farina, O.A. Ferretti, G.F. Barreto, EUDEBA (1986).

XI - Resumen de Objetivos

- Estudiar el comportamiento de los reactores químicos homogéneos ideales, haciendo uso de los conceptos aportados por la termodinámica, la cinética química, la mecánica de fluidos y los fenómenos de transporte, tendiendo a desarrollar en los alumnos distintas áreas del conocimiento de utilidad práctica, a saber:
- Habilidad para plantear, suponer y simplificar problemas.
- Capacidad para hacer el análisis crítico de soluciones presentadas en la literatura.
- Razonar de acuerdo a los fenómenos que se desarrollan.
- Conocer los métodos de caracterización de los reactores reales y la utilización de dos modelos que interpretan el comportamiento de reactores químicos con mezclado no ideal.
- Realizar los cálculos que permitan predecir la conversión en los reactores reales.

XII - Resumen del Programa

Introducción general. La reacción química: estequiometría, cinética y termodinámica. El reactor químico: características y clasificaciones. Concepto de mezclado ideal. Reactores ideales. Reactores de mezcla completa, discontinuos, semicontinuos y continuos. Reactores de flujo en pistón. Sistemas isotérmicos y no isotérmicos. Adiabáticos y no adiabáticos. Balances de materia y energía. Acoplamiento de las ecuaciones de balance. Procedimiento gráfico general de diseño. Metodología y aplicación a distintos sistemas y tipos de reactores. Estudio comparativo de reactores con mezclado ideal considerando reacciones simples y complejas. Efecto de la temperatura. Distribución de productos en función del tiempo para distintas situaciones de reacciones reversibles en serie y en paralelo. Efecto de mezclado no ideal en reactores químicos. Métodos de

caracterización experimentales estímulo-respuesta. Modelos que interpretan el comportamiento de reactores químicos con mezclado no ideal. Modelo de dispersión y de tanques en serie. Cálculo de conversión en sistemas reales.

XIII - Imprevistos

No se espera tener dificultades causadas por imprevistos.

XIV - Otros