



Ministerio de Cultura y Educación  
 Universidad Nacional de San Luis  
 Facultad de Ingeniería y Ciencias Agropecuarias  
 Departamento: Ingeniería de Procesos  
 Área: Procesos Químicos

(Programa del año 2010)  
 (Programa en trámite de aprobación)  
 (Presentado el 30/07/2010 11:32:36)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
Ingeniería de las Reacciones Químicas II	Ing. Química		2010	2° cuatrimestre

### II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ARDISSONE, DANIEL	Prof. Responsable	P.Asoc Exc	40 Hs
BACHILLER, ALICIA	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
HERRERO, ALFREDO RICARDO	Responsable de Práctico	JTP 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	3 Hs	3 Hs	2 Hs	8 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio	2° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
09/08/2010	19/11/2010	15	120

### IV - Fundamentación

El eje fundamental de la Asignatura es el diseño de reactores catalíticos heterogéneos. Tiene sus pilares fundamentales en materias tales como Termodinámica, Fisiocoquímica, Fenómenos de Transporte e Ingeniería de las Reacciones Químicas. Esta Asignatura e Ingeniería de las Reacciones Químicas I son las materias que marcan una de las diferencias más notables entre la educación del Ingeniero Químico y la de otros Ingenieros. De allí la importancia de su inclusión en el Plan de Estudios. Como asignaturas auxiliares son de particular importancia Computación y Métodos Numéricos.

### V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Una vez finalizada la asignatura el alumno deberá ser capaz de:

- 1.- Integrar conocimientos con las asignaturas previas: Termodinámica, Fisiocoquímica, Fenómenos de Transporte e Ingeniería de las Reacciones Químicas.
- 2.- Diseñar reactores catalíticos heterogéneos de lecho fijo.
- 3.- Evaluar desviaciones del comportamiento ideal y modelarlas en el sentido de optimizar los diseños.

### VI - Contenidos

**TEMA 1: REACCIONES HETEROGÉNEAS - CATALISIS HETEROGENEA**

**Reacciones heterogéneas. Características generales. Clasificación. Definición general de la catálisis. Catalizadores: propiedades. Desactivación. Etapas de una reacción catalítica. Velocidad global de reacción. Adsorción física y química. El modelo de Langmuir: tratamiento Cuantitativo. La teoría de adsorción en multicapas (Ecuación BET).** Propiedades físicas de los catalizadores. Superficie específica. Volumen hueco y densidad del sólido. Distribución de volumen de poros: método de penetración de mercurio, método de desorción de Nitrógeno.

## **TEMA 2: CINETICA HETEROGENEA**

**Reactores Catalíticos heterogéneos. Evaluación de reactores de laboratorio. Eliminación de controles.**

Expresiones de velocidad para reacciones catalíticas heterogéneas. Derivación de ecuaciones de velocidad. Adsorción.

Reacción química superficial. Desorción. Mecanismos. Etapa controlante.

Metodología de análisis cinético. Método diferencial: discriminación y estimación basada en la representación de los datos.

Estimación de parámetros por regresión lineal: a) Procedimiento de estimación; b) Propiedades estadísticas y pruebas de hipótesis. Estimación de parámetros por regresión no lineal. Método integral de análisis cinético.

## **TEMA 3: PROCESOS DE TRANSPORTE EXTERNO EN REACCIONES HETEROGÉNEAS**

**Efecto de los procesos físicos sobre la velocidad de reacción observada. Resistencia a la transferencia de materia.**

**Correlaciones. Difusión y reacción en la interfase. Factor de efectividad externo, isotérmico. Efectividad en términos de observables. Efectividad externa no isotérmica generalizada.**

## **TEMA 4: DIFUSIÓN Y REACCIÓN EN MEDIOS POROSOS**

**Transferencia de masa intragranular. Mecanismos de transferencia de materia en capilares. Difusión molecular, Knudsen, combinada, configuracional, superficial. Difusividad efectiva. Definición. Estima a partir de modelos de la estructura porosa. Modelo de poros paralelos. Modelo de poros en desorden.**

Interacción entre transferencia de masa y reacción. Partícula catalítica isotérmica: Diferentes geometrías. Módulo de Thiele.

Factor de efectividad interno. Módulo de Thiele observable. Reacciones limitadas por la difusión. Partícula no isotérmica.

Diferentes geometrías. Factor de efectividad.

Factor de efectividad global. Eliminación de regímenes limitados por reacción y difusión: criterio de Weisz-Prater, criterio de Mears.

## **TEMA 5: DISEÑO DE REACTORES HETEROGÉNEOS. REACTORES CATALÍTICOS**

**Introducción. Diseño de reactores para reacciones catalíticas heterogéneas. Tipos comercialmente significativos de reactores catalíticos heterogéneos. Reactores de lecho fijo. Reactores trickle-bed. Reactores de lecho móvil. Reactores de lecho fluidizado. Reactores slurry. Clasificación de los modelos de reactores de lecho fijo. Modelos pseudo-homogéneos de reactores de lecho fijo. Modelo unidimensional pseudo-homogéneo de reactores de lecho fijo. Modelo bidimensional pseudo-homogéneo de reactores de lecho fijo.**

## **TEMA 6 : REACTORES REALES**

**La técnica trazador respuesta. Discusión cualitativa. Ecuación de balance de trazador tiempo medio de Residencia.**

**Modelos para reactores no ideales. Modelos para reactores ideales. Flujo pistón y mezcla completa ideales.**

**Estancamiento. Canalizaciones. Dispersión. Modelo de dispersión. Modelo tanques en serie. Modelo en reciclo.**

**Reactor de flujo laminar.**

Modelo de Dispersión: La ecuación del modelo. Análisis dimensional.

Análisis de reactores con flujo pistón disperso. Correlaciones para coeficientes de dispersión. Efectos de la dispersión sobre la performance del reactor. Criterios para desprestigiar efectos de dispersión. Medición de coeficientes de dispersión.

Determinación

de  $\bar{t}$ .

Distribuciones de tiempos de residencia. Función de densidad de tiempos de residencia. Determinación de  $E(t)$  desde la respuesta a un impulso de trazador. Determinación del tiempo medio de residencia. Distribución de tiempo de residencia.

Determinación de  $F(t)$  desde una respuesta a trazador en escalón positiva o negativa. Tiempo reducido. Desviación desde los patrones de flujo ideal :zonas estancas. By-pass recirculación interna.

Micromezclado y modelo de flujo segregado. Pérdida de mezclado. Estados de agregación y mezclado. Modelo de flujo segregado. Modelo de máximo mezclado. Efecto del micromezclado sobre la conversión.

## VII - Plan de Trabajos Prácticos

### TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA

Consistirán en la resolución de problemas oportunamente propuestos por la cátedra, usando software apropiado en los casos que se requiera.

### TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO

- 1.- Determinación de distribución de tiempos de residencia en reactores tanques agitados continuos.
- 2.- Determinación de distribución de tiempos de residencia en reactores flujo pistón.

## VIII - Regimen de Aprobación

### REGIMEN DE ALUMNOS REGULARES

Para regularizar el curso, es requisito que los alumnos:

- 1.- Acrediten el 80 % de asistencia a los trabajos prácticos de aula.
- 2.- Realicen y aprueben el 100 % de los trabajos prácticos de laboratorio.
- 3.- Aprueben dos evaluaciones parciales o sus respectivos recuperatorios. Se prevé una recuperación general para aquellos alumnos que hayan aprobado uno de los parciales o su recuperación.

La aprobación de un examen oral individual completa la evaluación de la actividad curricular.

### REGIMEN DE ALUMNOS LIBRES

- 1.- Realizar y aprobar, como mínimo, un trabajo práctico de laboratorio.
- 2.- Aprobar un examen escrito basado en los trabajos prácticos de aula.
- 3.- Aprobar un examen oral de los temas teóricos del curso.

## IX - Bibliografía Básica

- [1] Ingeniería de las Reacciones Químicas. O. Levenspiel. Ed. Reverté.
- [2] Ingeniería de la Cinética Química. J.M. Smith. Ed. CECSA.3
- [3] An Introduction to chemical engineering kinetics & reactor design; Charles G. Hill, Jr. John Wiley & Sons
- [4] Elements of Chemical Reaction Engineering. H.Scott Fogler. Second Edition, Prentice Hall.
- [5] Guías de estudio de la asignatura.

## X - Bibliografía Complementaria

- [1] Chemical Reactor Analysis and Design. Froment & Bischof. J. Wiley and Sons. N.Y.

- [2] Análisis y Simulación de Procesos. Himmelblau, Bischoff. J. Wiley and Sons, N.Y.
- [3] Introducción al Diseño de Reactores Químicos. Ferreti, Farina y Barreto. Ed. EUDEBA.
- [4] Process Analysis by Statistical Methods. Himmelblau. J. Wiley and Sons. N.Y.
- [5] Chemical kinetics. Laidler K.J. Mc. Graw Hill Book Comp.
- [6] Introduction to the Analysis of Chemical Reactors. Aris R., Prentice Hall.
- [7] Elementary Chemical Reactor Analysis. Aris, R. Prentice Hall.
- [8] Kinetics of Chemical Processes. Boudart, M. Prentice Hall.
- [9] Chemical Process Principles. Hougen and Watson.
- [10] Trabajos publicados en revistas especializadas.

## **XI - Resumen de Objetivos**

Una vez finalizada la asignatura el alumno deberá ser capaz de:

- 1.- Integrar los conocimientos con los de las asignaturas previas: Termodinámica, Fisiología, Fenómenos de Transporte e Ingeniería de las Reacciones Químicas.
- 2.- Diseñar reactores catalíticos heterogéneos de lecho fijo.
- 3.- Evaluar desviaciones del comportamiento ideal y modelarlas en el sentido de optimizar los diseños.

## **XII - Resumen del Programa**

### **TEMA 1: REACCIONES HETEROGÉNEAS - CATALISIS HETEROGENEA**

Reacciones heterogéneas. Clasificación. Definición general de la catálisis. Catalizadores. Etapas de una reacción catalítica. Velocidad global de reacción. Propiedades físicas de los catalizadores

### **TEMA 2: CINÉTICA HETEROGENEA**

Expresiones de velocidad para reacciones catalíticas heterogéneas. Derivación de ecuaciones de velocidad. Metodología de análisis cinético.

### **TEMA 3: PROCESOS DE TRANSPORTE EXTERNO EN REACCIONES HETEROGÉNEAS**

Efecto de los procesos físicos sobre la velocidad de reacción observada. Factor de efectividad externo, isotérmico. Efectividad en términos de observables. Efectividad externa no isotérmica generalizada.

### **TEMA 4: DIFUSIÓN Y REACCIÓN EN MEDIOS POROSOS**

Transferencia de masa intragranular. Interacción entre transferencia de masa y reacción. Módulo de Thiele. Factor de efectividad interno. Módulo de Thiele observable. Reacciones limitadas por la difusión. Factor de efectividad. Factor de efectividad global. Eliminación de regímenes limitados por reacción y difusión: criterio de Weisz-Prater, criterio de Mears.

### **TEMA 5: DISEÑO DE REACTORES HETEROGÉNEOS. REACTORES CATALÍTICOS**

Diseño de reactores para reacciones catalíticas heterogéneas. Reactores de lecho fijo. Clasificación de los modelos de reactores de lecho fijo. Modelos pseudo-homogéneos de reactores de lecho fijo. Modelo unidimensional pseudo-homogéneo de reactores de lecho fijo. Modelo bidimensional pseudo-homogéneo de reactores de lecho fijo.

### **TEMA 6 : REACTORES REALES**

La técnica trazador respuesta. Modelos para reactores ideales. Estancamiento. Canalizaciones. Dispersión. Modelo de dispersión. Modelo tanques en serie. Modelo en reciclo. Reactor de flujo laminar. Modelo de Dispersión. Distribuciones de tiempos de residencia. Función de densidad de tiempos de residencia. Micromezclado y modelo de flujo

segregado. Perdición de mezclado. Estados de agregación y mezclado. Modelo de flujo segregado. Modelo de máximo mezclado. Efecto del micromezclado sobre la conversión.

### **XIII - Imprevistos**

--

### **XIV - Otros**

--

<b>ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA</b>	
	<b>Profesor Responsable</b>
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	