



Planificaciones

7608 - Ingeniería de la Reacciones Químicas

Docente responsable: AMADEO NORMA ELVIRA

OBJETIVOS

OBJETIVOS-

Siendo el diseño de los reactores químicos una actividad específica de los ingenieros químicos, cuyos fundamentos son aplicables incluso al análisis del macroreactor "planeta Tierra", se considera como objetivos fundamentales de esta asignatura:

1. Introducir a los estudiantes en la fenomenología de los procesos físicos y químicos que gobiernan las reacciones químicas y biológicas.
2. Desarrollar conductas metodológicas para facilitar el análisis de los procesos reactivos que ocurren en la naturaleza, su modelización, el análisis de las variables controlantes, su aplicación al diseño y operación de equipos de uso industrial generalmente agrupados bajo la denominación de reactores.
3. Facilitar la formulación de propuestas de cálculo que se adapten a reforzar el marco conceptual e incorporen procedimientos tecnológicamente avanzados y accesibles al estudiante de la FIUBA.
4. Promover la reflexión crítica sobre casos problemáticos a partir de la confrontación de ideas comunes preconcebidas versus el marco teórico desarrollado con miras a lograr la reconstrucción conceptual del fenómeno.

CONTENIDOS MÍNIMOS

-

PROGRAMA SINTÉTICO

Se retomarán conceptos fundamentales de la cinética química: Estequiometría. Termodinámica y equilibrio químico. Cinética de reacciones químicas homogéneas.

Se desarrollarán modelos fluidodinámicos de reactores químicos:

Reactor tanque agitado discontinuo. Reactor tanque agitado continuo. Reactor tubular. Análisis de las desviaciones a la hipótesis de flujo ideal.

Se ampliará los conceptos y modelos a sistemas de transferencia de masa con reacción química: Sistemas reaccionantes de dos fluidos inmiscibles. Sistemas reaccionantes con un fluido reactivo y un sólido catalítico. Sistemas reaccionantes con un fluido y un sólido reactivos.

PROGRAMA ANALÍTICO

Parte I: Fundamentos de la velocidad de reacción química

1. Estequiometría

1.1 Independencias de las reacciones

1.2 Medidas de los cambios debidos a la reacción química (grado de avance, conversión fraccional, reactivo limitante)

1.3 Medidas de concentración

1.4 Factor de expansión

2. Termodinámica y equilibrio

2.1 Calor de reacción, calor de formación

2.2 Variación del calor de reacción con la T a P = cte.

2.3 Equilibrio químico: energía libre, potencial químico, constante de equilibrio, conversión de equilibrio en reacciones simples

2.5 Condiciones de equilibrio para reacciones múltiples

2.6 Constantes de equilibrio, grado de avance en el equilibrio de reacciones múltiples

3. Cinética de reacciones químicas homogéneas

3.1 Clasificación de reacciones, definición de velocidad de reacción

3.2 Dependencia de la velocidad con la concentración, ecuación cinética

3.3 Cinética química y equilibrio. restricciones termodinámicas

3.4 Dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura

3.5 Ley de Arrhenius y estado de transición

3.6 Influencia del avance de la reacción, concentraciones iniciales y temperatura sobre la velocidad de reacción.

3.7 Reacción autocatalítica

3.8 Determinación de parámetros cinéticos. Métodos diferencial e integral. Método de las velocidades iniciales

3.9 Cinética de reacciones múltiples, gráficos composición vs. tiempo

3.10 Selectividad, rendimiento fraccional instantáneo y rendimiento fraccional global

Parte II: Modelos Fluido dinámicos de reactores químicos

4. Reactor tanque agitado discontinuo

4.1 Hipótesis del mezclado perfecto. Producción

- 4.2 Operación isotérmica del reactor TAD
 - 4.3 Balance de masa para $v = \text{cte}$ y v / cte
 - 4.4 Balance de energía
 - 4.5 Balance de energía en el fluido de intercambios camisa y serpentín
 - 4.6 Operación adiabática del reactor TAD
 - 4.7 Gráficos de conversión temperatura, react a de operación adiabática, camino de óptimos
 - 4.8 Operación no isotérmica ni adiabática (NINA) del reactor TAD
 - 4.9 Tiempo de operación mínimo (isotérmico, adiabático, (NINA)
 - 4.10 Operación óptima del reactor TAD
 - 5. Reactor tanque agitado continuo
 - 5.1 Balance de masa para $r = \text{cte}$ y variable
 - 5.2 Balance de energía
 - 5.3 Operación isotérmica, calor intercambiado, ecuación de diseño para el estado estacionario
 - 5.4 Tiempo espacial y velocidad espacial
 - 5.5 Operación adiabática del reactor TAC
 - 5.6 Operación óptima del reactor TAC (camino de velocidad óptimas y velocidad máximas)
 - 5.7 Operación NINA del reactor TAC
 - 5.8 Multiplicidad de estados estacionarios. Histéresis del estado estacionario
 - 5.9 Análisis del estado no reaccionario y puesta en marcha TAC
 - 5.10 Sistema de múltiples reactores TAC. Combinación en serie y en paralelo.
 - 6. Reactor Tubular
 - 6.1 Hipótesis del flujo en pistón
 - 6.2 Balance de masa para $= \text{cte}$ y variable
 - 6.3 Balance de energía
 - 6.4 Tiempo espacial y tiempo medio de residencia
 - 6.5 Operación isotérmica. Óptimo isotérmico
 - 6.6 Operación adiabática. Óptimo adiabático
 - 6.7 Operación NINA. Camino de velocidades óptimas
 - 6.8 Estabilidad y sensibilidad de los reactores TUB. "Hot Spot"
 - 6.9 Criterios para minimizar el "Hot Spot"
 - 6.10 Reactor autotérmico
 - 6.11 Reactor TUB con reciclo. Su aplicación a reacciones auto catalíticas y exotérmicas y a la determinación de parámetros cinéticos
 - 7. Comparación de reactores
 - 7.1 Comparación en el comportamiento de los reactores ideales para reacciones simples de distintos órdenes
 - 7.2 Sistema de múltiples reactores
 - 7.3 Reacciones múltiples. Selectividad y rendimiento fraccionales. Influencia de la composición y la temperatura
 - 7.4 Reacciones en paralelo. Determinación de parámetros cinéticos. Cinética de reacciones homogéneas catalizadas. Distribución del producto y tamaño reactor
 - 7.5 Reacciones en serie. Concentraciones máximas y balances para el TAD, TUB y TAC. Rendimiento fraccional, global, reactor y condiciones de operación óptimas
 - 7.6 Reacciones serie-paralelo. Balances para TAD, TUB y TAC, representaciones gráficas, presencia inicial de productos. Aplicaciones.
 - 7.7 Elección del tipo de reactor, factores químicos, térmicos y económicos.
 - 8. Desviaciones a las hipótesis de flujo ideal
 - 8.1 Funciones de distribución de tiempos de residencia
 - 8.2 Modelos de un parámetro. Modelo de segregación total, de dispersión axial, de tanques agitados en serie y TUB con reciclo
 - 8.3 Otros modelos combinados
 - 8.4 Determinación de flujos defectuosos en equipos de procesos
 - 8.5 Modelos para lechos fluidizados
- Parta III: Transferencia de masa con reacción química
- 9. Reacciones y reactores fluido-fluido
 - 9.1 Teoría de la transferencia de materia con reacción química. Modelo de película
 - 9.2 El factor de reacción. Reactores de primer y pseudo primer orden. Reacciones de segundo orden infinitamente rápidas. Reacción de orden n
 - 9.3 Criterios de elección. Diseño
 - 9.4 Cálculo de columnas rellenas
 - 9.5 Cálculo de columnas de burbujeo
 - 10. Reacciones y reactores sólido catalítico - fluido
 - 10.1 Mecanismo de las reacciones catalíticas. Adsorción en superficies sólidas. Propiedades de los catalizadores. Determinación del área superficial, volumen poral, densidad y distribución del volumen de poros. Clasificación y

preparación de catalizadores. Promotores, inhibidores y venenos.

10.2 Cinética de mecanismos sin resistencias difusionales. Quimisorción. Isotermas de adsorción. Velocidades de reacción, etapas controlantes. Interpretación cuantitativa de los datos cinéticos.

10.3 Cinética de mecanismos con resistencias difusionales en pastillas. Transferencia intragranular de masa, cálculo de difusividades. Transferencia intragranular de calor. Transferencia de masa con reacción química, factor de efectividad isotérmico. Transferencia de masa y calor con reacción química; factor de efectividad no isotérmico.

10.4 Cinética de mecanismos con resistencias difusionales en película. Efecto de los procesos físicos sobre las velocidades observadas. Correlaciones de transferencia de masa y calor. Diferencias de temperaturas y estados estacionarios. Factor de efectividad y selectividad.

10.5 Reactores con relleno. Porosidad de lecho

10.6 Variación de presión

10.7 Esquema pseudo-homogéneo de diseño

11. Reacciones y reactores sólido no catalítico - fluido

11.1 Modelos: homogéneo, heterogéneo y generalizado (Wan)

11.2 Modelo del frente móvil

11.3 Etapas controlante para partículas de tamaño constante y tamaño decreciente

11.4 Determinación de la etapa controlante de velocidad

11.5 Diseño de lechos de partículas de un solo tamaño

11.6 Diseño de lechos de partículas de tamaños diferentes

11.7 Lechos fluidizados

11.8 Cintas transportadoras, bandejas

BIBLIOGRAFÍA

1-Introducción al Diseño de Reactores Químicos Fariña, Ferreti y Barreto. EUDEBA, Buenos Aires, 1986.

2-- Ingeniería de las Reacciones Químicas Smith J.H, CECOSA, México, 1977.

3-Ingeniería de las Reacciones Químicas Levenspiel O., Reverté, Barcelona, 1974.

4-Introduction to the Analysis of Chemical Reactors Aris R., Prentice hall, Inc., Englewood Cliff, 1965.

5-Chemical Reactores Analysis and Design Froment y Bischoff, John Wiley and Sons, New York, 1979.

6-Chemical and Catalytic Reaction Engineering Carberry J.J., Mc. Graw Hill Book Company, Ney York, 1976.

7-Fundamentos del diseño de Reactores Cuningham R.E, EUDEBA, Buenos Aires, 1978.

8-An Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design, Hill C.G. , jhon Wiley and Sons, Inc. , Nueva York, 1977.

RÉGIMEN DE CURSADA

Metodología de enseñanza

La metodología que se empleará estará fundamentada en la teoría constructivista del acto pedagógico a través de la relación ternaria contenido-alumno-docente.

Las clases serán teorico practicas incentivando al alumno a la resolución del problema con los elementos impartidos y luego se discute entre todos la metodología aplicada.

Se acudirá permanentemente a que los estudiantes indaguen ideas, comprueben hipótesis e identifiquen supuestos relacionados con la realidad profesional.

Modalidad de Evaluación Parcial

Se adoptará los calendarios, frecuencia y posibilidades establecidas reglamentariamente por la FIUBA consistente en una evaluación parcial que se realizará en dos etapas y una evaluación integradora. La evaluación parcial podrá recuperarse en dos oportunidades. Conjuntamente con el desarrollo del curso se efectuará una evaluación permanente contemplándose la participación, dedicación y evolución en el conocimiento del contenido curricular.

Las evaluaciones parciales en sus dos etapas serán de características teóricas conceptuales y teórico prácticos con aplicación de metodologías de cálculo. Se aprobarán con un mínimo de 4 puntos y aquellos que hayan logrado 7 puntos o más en la primera oportunidad fijada para cada parte, si lo desean estarán eximidos de rendir la evaluación integradora.

Las evaluaciones parciales serán escritas, aunque en caso de requerirse mayor precisión sobre algunos desarrollos, podrá incluirse diálogos adicionales. Los exámenes corregidos con las aclaraciones correspondientes se reintegrarán a cada alumno con la finalidad de reconstruir conceptos erróneos y propiciar el análisis crítico de los temas.

Las evaluaciones parciales serán corregidas por el conjunto de los docentes, aplicándose criterios unánimes y haciendo hincapié en los aspectos conceptuales vertidos por el alumno. Para su aprobación se requerirá haber logrado la conformación de marcos conceptuales mínimos en todos los temas evaluados.

La evaluación integradora será oral y consistirá en el desarrollo y exposición de un tema en particular del programa, el cual deberá relacionarse a través del hilo conductor de la asignatura con otros temas de la misma u otras asignaturas relacionadas, teniéndose en cuenta así el carácter integrador de la evaluación.

CALENDARIO DE CLASES

Semana	Temas de teoría	Resolución de problemas	Laboratorio	Otro tipo	Fecha entrega Informe TP	Bibliografía básica
<1> 09/03 al 14/03	Estequiometria Equilibrio	Estequiometria				
<2> 16/03 al 21/03	Equilibrio- Cinetica	Equilibrio				
<3> 23/03 al 28/03	Reactores Tanque. Reactores Tanque discontinuos	Cinetica				
<4> 30/03 al 04/04	Reactores TAD. Balance de masa y de energia	Cinetica				
<5> 06/04 al 11/04	Reactores Tanque continuos. Balance de masa y energia	Reactores Tanque				
<6> 13/04 al 18/04	Reactores Tanque continuos.	Reactores Tanque				
<7> 20/04 al 25/04	Reactores Flujo Piston. balance de masa y energia	Reactores Tanque				
<8> 27/04 al 02/05	Reacciones multiples	Reactores Flujo Piston				
<9> 04/05 al 09/05	Reacciones Multiples	Reacciones Multiples				
<10> 11/05 al 16/05	repaso y parcial	repaso				
<11> 18/05 al 23/05	Reactores Reales	Reactores Reales				
<12> 25/05 al 30/05	Reacciones Gas Liquido	Reacciones Gas-liquido				
<13> 01/06 al 06/06	Reacciones solido reactivo	Reacciones solido reactivo				
<14> 08/06 al 13/06	Catalisis	Catalisis				
<15> 15/06 al 20/06	Catalisis	Catalisis				
<16> 22/06 al 27/06	repaso - evaluacion parcial					

CALENDARIO DE EVALUACIONES

Evaluación Parcial

Oportunidad	Semana	Fecha	Hora	Aula
1º	10	10/05		
2º	16	21/06		
3º				
4º				
Otras observaciones				
Esta materia es equivalente a la del nuevo plan 7653				