



## PLAN DE ESTUDIOS 2002

ASIGNATURA: **INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS I**  
CÓDIGO **Q810**  
ESPECIALIDAD/ES: **Ingeniería Química**

### Contenidos Analíticos:

#### MÓDULO I: Reactores Homogéneos a Temperatura Especificada

UNIDAD I: Sistemas con una única reacción química.

- **CINÉTICA QUÍMICA HOMOGÉNEA:** Definición de velocidad de producción neta por reacción química y su relaciones con la estequiometría de la reacción: definición de la velocidad de reacción  $r$ . Dependencia de  $r$  con las variables de estado. El "principio" de acción de masas. Reacciones elementales. Definición de constantes específicas de velocidad de reacción. Etapas elementales de los mecanismos de reacción. Intermediarios de reacción. La expresión cinética a partir de la integración de las etapas elementales. Expresiones cinéticas de tipo empírico. Ordenes de reacción. Consistencia termodinámica. Reacciones "normales", de orden cero, de orden negativo, autocatalíticas y catalíticas homogéneas.

- **EL REACTOR TANQUE AGITADO DISCONTINUO (TAD):** Hipótesis de mezclado perfecto. Balance de materia por componentes. Introducción de la suposición de densidad constante. Expresiones de balance en términos de concentración de reactivo clave, grado de avance y conversión. Relaciones composición-tiempo de reacción; ejemplos. Definición de ciclos operativos, tiempos muertos y producción. Determinación de la capacidad del reactor cuando se especifica la producción y la conversión o el tiempo de reacción. Posibilidad de elegir tiempos que maximizan la producción o minimicen el volumen. Casos prácticos para los cuales se justifica la operación discontinua.

- **EL REACTOR TANQUE AGITADO CONTINUO (TAC):** Balance de materia por componentes. Expresiones de balance en términos de concentración de reactivo clave, grado de avance y conversión. Relaciones composición tiempo de residencia. Definición de producción para operaciones continuas. Determinación de la capacidad del reactor cuando se especifica la producción y la conversión o el tiempo de residencia. Posibilidad de elegir tiempos que maximizan la producción o minimicen el volumen. Ejemplo de optimización cuando se consideran costos de compresión. Reactores TAC en serie (TAS). Balance de materia para densidad constante. Solución analítica para el caso de cinética de primer orden. Caso general. Optimización del número de tanques.

- **EL REACTOR TUBULAR (TUB):** Hipótesis de flujo pistón. Balance de materia por componentes. Expresiones de balance en términos de concentración de reactivo



clave, grado de avance y conversión. Analogía entre TAD y TUB y su consecuencia para las relaciones conversión-tiempo de residencia. Determinación de la capacidad del reactor cuando se especifica la producción y la conversión o el tiempo de residencia. Posibilidad de elegir tiempos que maximizan la producción o minimicen el volumen. Ejemplo de optimización cuando se consideran costos de compresión. Comparación de TAD, TAC, TAS, TUB.

- DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS CINÉTICOS: Empleo de reactores TAD. Obtención de curvas composición-tiempo. Método diferencial y aplicación del método de mínimos cuadrados. Ejemplo para una cinética de primer orden. Caso general, necesidad de resolver un problema algebraico no lineal. Transformaciones para obtener un problema lineal. Método integral y aplicación de mínimos cuadrados. Transformaciones para obtener un problema lineal. Empleo de reactores TAC. Obtención directa de datos de  $r$ . Empleo de reactores TUB: analogía y diferencias con el uso de un TAD.

UNIDAD II: Estequiometría y Equilibrio Químico para múltiples reacciones.

- ESTEQUIOMETRÍA: Expresión simbólica de un conjunto de reacciones químicas. Relaciones estequiométricas en función de los grados de avance. Definición de matriz estequiométrica. Solución del sistema de ecuaciones estequiométricas para obtener relaciones entre los moles de las especies principales y especies secundarias. Obtención del sistema mínimo de balances para resolver el sistema. Caso cuando el rango de la matriz estequiométrica es inferior al número de reacciones: dependencia lineal de las reacciones.

- EQUILIBRIO QUÍMICO (revisión de conceptos): El criterio termodinámico de equilibrio en sistemas reaccionantes homogéneos. Evaluación de potenciales químicos de sustancias puras a partir de energías de libres de formación y su dependencia con la temperatura, presión y estado de agregación. Conceptos de fugacidad y actividad. Expresiones finales para el cálculo de la composición de equilibrio en sistemas ideales y reales. Efecto de la presión, temperatura y composición inicial sobre la posición del equilibrio.

UNIDAD III: Análisis de reactores homogéneos con reacciones múltiples

Resolución de balances de materia en reactores TAD para obtener relaciones composición-tiempo. Reacciones en serie y paralelo. Concepto de selectividad y rendimiento, instantáneos y globales. Posibilidad de establecer tiempos de reacción que maximicen selectividad o rendimiento. Cálculo del volumen del reactor en función de la producción o viceversa. Extensión de los conceptos anteriores para el caso de reactores continuos (TAC, TAS, TUB).

## MÓDULO II: Efectos Térmicos en Reactores Homogéneos

UNIDAD IV: Efectos de la temperatura sobre la velocidad de reacción. Ley de Arrhenius.

Ley de Arrhenius, determinación experimental de constantes pre-exponenciales y



energías de activación. Consistencia termodinámica y temperatura. Efecto neto de  $T$  sobre  $r$  para reacciones irreversibles, exotérmicas y endotérmicas. Gráficos  $r$ ,  $X$ ,  $T$ . La progresión de temperaturas que maximiza  $r$  para reacciones exotérmicas reversibles.

UNIDAD V: Efectos térmicos en reactores homogéneos con mezcla perfecta.

Tipos de dispositivos de intercambio en reactores tanque agitado. Planteo general de balance de energía para un reactor tanque en estado no estacionario y con corrientes de entrada y salida. Expresión del calor intercambiado para distintos tipos de fluido de y dispositivos de intercambio.

- REACTOR TAD: Caso adiabático. Desacoplamiento de los balances de materia y energía. Temperaturas óptimas para procesos adiabático e isotérmico con reacción única. Políticas térmicas "óptimas" para una sola reacción y reacciones serie y paralelo. Variables operativas para modificar el calor intercambiado en función del tiempo. Estrategia general para resolver simultáneamente los balances de materia y calor.

- REACTOR DISCONTINUO CON CORRIENTES ALIMENTACIÓN/EXTRACCIÓN: Casos en que este tipo de operación resulta conveniente (selectividad, transferencia de calor, reversibilidad). Estrategia general para resolver los balances de energía y materia. El tratamiento de las reacciones "instantáneas". Ejemplos.

- REACTOR TAC: Procedimiento para la resolución de los balances. Caso adiabático. Temperatura óptima de operación para reacciones únicas. Visualización del estado de operación del reactor para una única reacción en diagramas "calor eliminado-calor generado". Estados estacionarios múltiples, retroalimentación térmica, estabilidad del estado estacionario. Enfoque cualitativo para la condición suficiente de inestabilidad del estado estacionario. Enfoque cuantitativo para la determinación de la estabilidad. Histéresis del funcionamiento del reactor. Reactores TAC con reacciones exotérmicas: uso de intercambiadores externos para aprovechar el calor de la reacción. Estrategia de resolución de los balances en el caso general y extensión a TAS. Criterios de verificación de la hipótesis de mezclado perfecto.

UNIDAD VI: Efectos térmicos en reactores tubulares.

Descripción de los sistemas de intercambio de calor en reactores tubulares.

Balance de calor en reactores tubulares en estado estacionario. El fluido de intercambio: operación co y contracorriente.

Diferencias y similitudes con reactores TAD y TAC .

Posibilidad de operación isotérmica en reactores tubulares.

Variables geométricas para el diseño de reactores multitubulares: longitud, diámetro y número de tubos.

Sistemas con variación de densidad. El factor de expansión.

Características de reacciones exotérmicas. Sensibilidad paramétrica.

Reactores adiabáticos de múltiples etapas.

Reactores autotérmicos. Los distintos esquemas. Estados estacionarios múltiples, estabilidad, histéresis.



### **BIBLIOGRAFÍA GENERAL:**

- Barreto, G. F., "Reactores Homogéneos con temperatura especificada", Guía de Estudios Parte I, Departamento de Ingeniería Química, 2000 (Biblioteca Depto. Ingeniería Química).
- Barreto, G. F., "Reactores Homogéneos con efectos Térmicos", Guía de Estudios Parte IIa: Reactor Tanque Agitado Discontinuo, Departamento de Ingeniería Química, 2000 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química)
- Mazza, G. D., "Reactores Homogéneos con efectos Térmicos", Guía de Estudios Parte IIb y Parte IIc: Reactores Tanque Agitado Continuo y Tubulares, Departamento de Ingeniería Química, 2000 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química).
- 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)

#### Bibliografía complementaria:

- Aris, R., "Análisis de Reactores", Editorial Alhambra, 1973 (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