Ministerio de Cultura y Educación **(Programa del año 2008)**
Universidad Nacional de San Luis **(Programa en trámite de aprobación)**
Facultad de Ingenieria y Ciencias Economicas y Sociales **(Presentado el 11/07/2008 10:28:59)**
Departamento: Ingenieria
Area: Procesos Quimicos

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
Ingeniería de las Reacciones Químicas II	Ing.Química	6/97-2/03	4	2c

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	**Teóricas**	**Prácticas de Aula**	**Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.**	**Total**
7 Hs	Hs	Hs	1 Hs	8 Hs

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

Duración			
Desde	**Hasta**	**Cantidad de Semanas**	**Cantidad de Horas**
11/08/2008	21/11/2008	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 la Termodinámica, la Fisicoquímica, los Fenómenos de Transporte y la Ingeniería de las Reacciones Químicas.
Esta Asignatura y la Ingeniería de las Reacciones Químicas son las materias que marcan una de las diferentes 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 la Computación y los Métodos Numéricos.

V - Objetivos

Se plantean como objetivos los siguientes:
Una vez finalizada la asignatura el alumno deberá ser capaz de:

1.- Integrar los conocimientos de las asignaturas previas, Termodinámica, Fisiqoquímica, 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 perfomance del reactor. Criterios para despreciar efectos de dispersión. Medición de coeficientes de dispersión.

Determinación
de De.
Distribuciones de tiempos de residencia. Función de densidad de tiempos de residencia. Determinación de E(t) desde la repuesta 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. Perdición 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. A su vez deberán resolverse problemas con el auxilio de la computadora para lo cual los mismos serán planteados en el aula y posteriormente aplicados en máquina.

TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO

Se realizarán los siguientes trabajos prácticos de laboratorio:
1.- Determinación de distribución de tiempos de residencia en reactores tanque agitado continuos.
2.- Determinación de distribución de tiempos de residencia en reactores flujo pistón.

VIII - Regimen de Aprobación

Para acceder a la condición de alumno regular el alumno deberá
cumplir los siguientes requisitos:
1.- Acreditar el 80 % de asistencia a los trabajos prácticos de aula y la realización del 100 % de los trabajos prácticos de laboratorio.
2.- Deberá aprobar dos exámenes parciales. Ambos tendrán una recuperación. Habrá además una recuperación general. Para optar a esta instancia el alumno deberá aprobar uno de los parciales o su recuperación.

El examen final de la materia consistirá de una evaluación oral de los conceptos teóricos y prácticos que el alumno deberá conocer para alcanzar una formación adecuada en el diseño de reactores.

IX - Bibliografía Básica

[1] [1] 1.- Ingeniería de las Reacciones Químicas. O. Levenspiel. Ed. Reverté.
[2] [2] 2.- Ingeniería de la Cinética Química. J.M. Smith. Ed. CECSA.3
[3] [3] 3.- An Introduction to chemical engineering kinetics & reactor design.
[4] [4] Charles G. Hill, Jr. John Wiley & Sons
[5] [5] 4- Elements of Chemical Reaction Engineering. H.Scott Fogler. Second Edition, Prentice Hall.
[6] [6] 5- Apuntes de Cátedra.

X - Bibliografia Complementaria

[1] 1] 1.- Chemical Reactor Analysis and Design. Froment & Bischof. J. Wiley and Sons. N.Y.
[2] [2] 2.- Análisis y Simulación de Procesos. Himmelblau, Bischoff. J. Wiley and Sons, N.Y.
[3] [3] 3.- Introducción al Diseño de Reactores Químicos. Ferreti, Farina y Barreto. Ed. EUDEBA.
[4] [4] 4.- Process Analysis by Statistical Methods. Himmelblau. J. Wiley and Sons. N.Y.
[5] [5] 5.- Chemical kinetics. Laidler K.J. Mc. Graw Hill Book Comp.
[6] [6] 6.- Introduction to the Analysis of Chemical Reactors. Aris R., Prentice Hall.
[7] [7] 7.- Elementary Chemical Reactor Analysis. Aris, R. Prentice Hall.
[8] [8] 8.- Kinetics of Chemical Processes. Boudart, M. Prentice Hall.
[9] [9] 9.- Chemical Process Principles. Hougen and Watson.
[10] [10] 10.- Trabajos publicados en revistas especializadas.

XI - Resumen de Objetivos

Se plantean como objetivos los siguientes:
Una vez finalizada la asignatura el alumno deberá ser capaz de:

1.- Integrar los conocimientos de las asignaturas previas, Termodinámica, Fisiqoquímica, 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: CINETICA 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

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA	
	Profesor Responsable
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	