



## PLAN DE ESTUDIOS 2002

ASIGNATURA: **INGENIERÍA DE REACTORES  
HETEROGÉNEOS**

CÓDIGO **Q830**

ESPECIALIDAD/ES: **Ingeniería Química - Orientación  
Procesos**

### Contenidos Analíticos:

#### \* UNIDAD I:

##### CINÉTICA CATALÍTICA EN SUPERFICIES NO UNIFORMES

Consideraciones preliminares para el caso de superficies uniformes. Etapas elementales que involucran mas de una especie superficial. Frecuencia de rotación, dispersión metálica y tamaño de partícula. Reacciones con dos etapas elementales limitantes en superficies ideales; tratamiento de Temkin-Boudart; Concepto de especie superficial más abundante; Ejemplos. Reacciones sobre superficies no-uniformes; tratamiento para una reacción lineal de dos etapas; relación de Bronsted y planteo de Evans-Polanyi. Óptimo valor de la afinidad. Extensión al caso de adsorción en sitios múltiples; etapa controlante en superficies no-uniformes; ejemplos.

##### CINÉTICA CATALÍTICA PARA REACCIONES MÚLTIPLES

Concepto de rutas de reacción linealmente independiente a partir de un mecanismo de reacción. Determinación de las velocidades para las rutas y para las reacciones catalíticas; aplicaciones.

##### CINÉTICA DE DESACTIVACIÓN DE CATALIZADORES.

Origen de la desactivación en catalizadores. Posibilidad de regeneración del catalizador. Mecanismos básicos de desactivación: desactivación en paralelo, desactivación en serie, desactivación por impureza, desactivación independiente. Efectos de la difusión intraparticular. Cinética efectiva de desactivación; ajuste mediante orden de desactivación efectivo; identificación experimental.

#### \* UNIDAD II:

##### REACCIONES MÚLTIPLES EN PROCESOS CATALÍTICOS.

Reacciones múltiples en catalizadores sólidos. Ejemplos. Planteo general. Reacciones múltiples independientes, en paralelo y en serie. Análisis de la influencia del transporte de materia sobre la selectividad en reacciones múltiples. Resistencia al transporte de materia en el medio poroso y en el exterior de la pastilla. Estudio de la influencia de las



resistencias a la transferencia simultánea de calor y materia en reacciones catalíticas múltiples.

#### IMPREGNACIÓN NO UNIFORME DE LA PASTILLA CATALÍTICA

Impregnación no uniforme de la pastilla catalítica. Perfiles de concentración. Aplicaciones a los casos de reacción única y de reacciones múltiples. Influencia sobre la selectividad en reacciones múltiples.

\* UNIDAD III:

#### MODELOS DE REACTORES CATALITICOS DE LECHO FIJO

Modelado de reactores catalíticos de lecho fijo adiabáticos y con intercambio térmico a través de las paredes. Modelos unidimensionales y bidimensionales. Modelos pseudohomogéneo y heterogéneos. Criterios de comparación de modelos. Modelos unidimensionales perfeccionados. Evaluación de parámetros básicos de transferencia de calor. Correlaciones. Relación entre los parámetros de transferencia de calor de cada modelo. Comparación de modelos heterogéneos unidimensionales y bidimensional. Comparación de modelos heterogéneos y pseudohomogéneos. Criterios para la utilización de cada modelo. Sensibilidad paramétrica en reactores catalíticos heterogéneos.

\* UNIDAD IV:

#### CRITERIOS DE DISEÑO, SELECCIÓN Y OPERACIÓN DE REACTORES DE LECHO FIJO

Estrategia de diseño; variables de decisión, especificaciones y restricciones, vínculos. Criterios para establecer la configuración del sistema de reacción y para la establecer las variables introducidas por las corrientes de alimentación de reactivos y fluidos de intercambio de calor, por el catalizador y por la geometría de los recipientes y sistema de intercambio de calor. Costos de recipientes y de compresión. Ejemplos para determinar en forma óptima las variables geométricas.

#### CRITERIOS PARA DEFINIR NIVELES DE TEMPERATURA ÓPTIMA

Sistemas de lechos adiabáticos en serie y con recirculación. Reactores multitubulares: operaciones con intercambio en cocorriente y contracorriente, autérmicas o con fluido de intercambio, con o sin precalentamiento. Efecto de la circulación del fluido en la carcasa. Principio de optimalidad para establecer perfiles óptimos de temperatura

\* UNIDAD V:

#### REACTORES CATALÍTICOS DE LECHO FLUIDIZADO Y DE LECHO TRANSPORTADO.

Generalidades sobre las características y operación de lechos fluidizados por gas. Pérdida de carga y balance de fuerzas en el lecho. Velocidad de mínima fluidización. Tipos de fluidización: uniforme y agregativa. Expansión del lecho fluidizado. Velocidad



de mínimo burbujeo. Fase densa y fase "burbuja". Clasificación de Geldart de las partículas y regímenes de fluidización posibles: Régimen "slug", burbujeo, fluidización turbulenta, transporte neumático. Características térmicas y transferencia de calor hacia elementos sumergidos. Modelización de reactores de lecho fluidizado. Ejemplos. Cracking catalítico. Combustión de carbón.

#### REACTORES CATALÍTICOS CON FLUJO BIFÁSICO.

Reactor de lecho fijo con flujo bifásico descendente ("trickle bed"). Regímenes de flujo. Pérdida de carga y retención líquida. Distribución de fases fluidas. Transferencia de materia gas-líquido y líquido-sólido. Modelización. Ejemplos.

Reactor de lecho fijo con flujo bifásico ascendente. Regímenes de flujo, pérdida de carga y retención líquida. Transferencia de materia gas-líquido y líquido-sólido.

Reactores agitados con catalizador en suspensión (Reactores tipo "slurry"). Características principales. Modelización. Descripción de aplicaciones.

#### \* UNIDAD VI:

##### REACTORES DE PARED CATALÍTICA.

Características principales y ventajas con respecto a reactores con catalizador particulado. Aplicaciones para descontaminación de efluentes gaseosos; el caso de humos industriales y gases de salida de motores de combustión interna; aplicación en la combustión catalítica.

##### REACTORES MULTIFUNCIONALES

Columnas de destilación reactiva. Reacciones con limitaciones termodinámicas, caso de la síntesis de éteres y ésteres. Otras aplicaciones. Configuración para el relleno catalítico.

Reactores de membrana; descripción y características; usos mas frecuentes: selectividad por diferencia de permeabilidad, como moderador para reacciones fuertemente exotérmicas.

#### \* UNIDAD VII:

##### REACTORES DE LABORATORIO

Reactores de laboratorio para determinaciones cinéticas de reacciones catalíticas. El efecto de las limitaciones al transporte de materia y energía. Modos de operación: discontinuo, continuo, por pulso. Reactores con aproximación al mezclado perfecto: con catalizador en suspensión (tipo "slurry"), con catalizador en canasta rotatoria (tipo Carberry), reactor con lecho fijo y recirculación interna (tipo Berty).

Reactores tipo tubular: de un solo paso con modalidad integral o diferencial; técnicas para lograr operación isotérmica; reactores con recirculación externa.

Reactores fluidizados: reactor fluidizado con reciclo interno (tipo Kraemer-deLasa).

Calidad de la información obtenida y tratamiento de la misma.

#### **BIBLIOGRAFÍA GENERAL:**



- Farina, I. H., Ferretti, O. A., Barreto, G. F., "Introducción al Diseño de Reactores Químicos", EUDEBA, 1986 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química).
- Barreto, G. F., Martínez, O. M. y Mazza, G. D. "Modelado de Reactores Catalíticos de Lecho Fijo", Apunte del Area Ingeniería de las Reacciones Químicas, Departamento de Ing. Química, UNLP, 1996 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química).
- Barreto, G. F., "Diseño de Reactores Catalíticos de Lecho Fijo", Apunte del Area Ingeniería de las Reacciones Químicas, Departamento de Ing. Química, UNLP, 1993 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química).

Bibliografía complementaria:

- Barreto G. F., "Elementos de cinética catalítica", Facultad de Ingeniería, UNLP, 1995 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química).
- Froment, G. F. and K. Bischoff., "Chemical Reactor Analysis and Design", Second Edition, Ed. John Wiley & Sons., 1990 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química).
- Kaštánek, F., Zahradník, J., Kratochvíl, J. and. , "Chemical Reactors for gas-liquid systems", ELLIS HORWOOD Series in Chem.Engineering, 1993 (Biblioteca del Dpto. de Ingeniería Química).
- Westerterp, K. R., Van Swaaij, W. P. M., Beenackers, A.A.C.M., "Chemical Reactor Design and Operation", Wiley, 1990 (Biblioteca del CINDECA).
- Elnashaie S. S. E. H., Elshishini S. S., "Modelling, Simulation and Optimization of Industrial Fixed Bed Catalytic Reactors", Gordon and Breach Sci. Publishers, 1993 (Biblioteca del Depto. de Ingeniería Química).
- Rase, H. F., "Fixed-Bed Reactor Design and Diagnostics. Gas Phase Reactions", Butterworths, 1990 (Biblioteca del CINDECA).