

INTRODUCCIÓN al DISEÑO DE REACTORES

Departamento Ingeniería de Reactores

Dra.Ing. Liliana Borzacconi lilianab@fing.edu.uy

Dra.Ing. Patricia Lema plema@fing.edu.uy

Dr.Ing. Iván López ivanl@fing.edu.uy

1

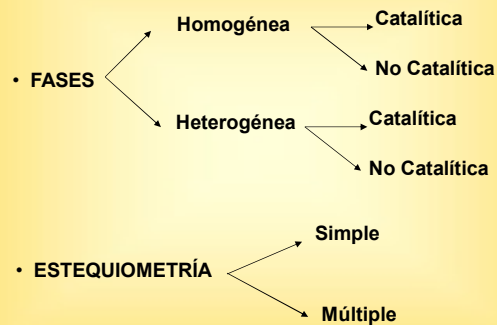
Introducción Diseño de Reactores

- Revisión de cinética de reacciones
- Reactores ideales
- Reactores reales
- Sistemas heterogéneos

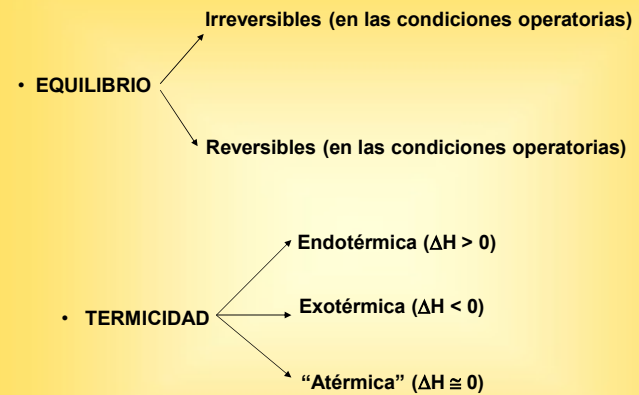
2

CLASIFICACION DE LAS REACCIONES QUIMICAS

CRITERIOS:



3



4

CONCENTRACIÓN

• Molar:

$$C_j = \frac{N_j}{V} \quad N_j: \text{número de moles de la especie } j$$

$$V: \text{volumen de la mezcla reaccionante}$$

$$\text{TOTAL: } C = \sum C_j = \frac{N}{V} \quad N = \sum N_j$$

• Másica:

$$\rho_j = \frac{M_j}{V}$$

$$\text{TOTAL: } \rho = \sum \rho_j = \frac{M}{V} \quad M = \sum M_j$$

5

• Fracción Molar:

$$y_j = \frac{N_j}{N}$$

• Presión Parcial (P_j):

Para mezcla de gases ideales:

$$P_j = y_j \cdot P \quad P: \text{Presión total del sistema}$$

Gas ideal: $PV = NRT$

$$P_j = \frac{N_j \cdot R \cdot T}{V} = C_j \cdot R \cdot T$$

$$C_j = \frac{v_j \cdot P}{R \cdot T}$$

Gas no ideal:

$$P_j = C_j \cdot z_j \cdot R \cdot T$$

6

MEDIDA DE CAMBIO

GRADO DE AVANCE (ξ)

$$\xi \equiv \frac{(N_j - N_{j_0})}{v_j} = \frac{(N_s - N_{s_0})}{v_s}$$

$$N_j = N_{j_0} + v_j \cdot \xi$$

$$N_s = N_{s_0} + v_s \cdot \xi = N_{s_0} + \frac{v_s}{v_j} \cdot (N_j - N_{j_0})$$

R reacciones simultáneas: ξ_i

$$N_j = N_{j_0} + \sum v_{ij} \cdot \xi_i$$

7

CONVERSIÓN FRACCIONAL: X_j

$$X_j \equiv \frac{\text{Moles de } J \text{ que reaccionaron}}{\text{Moles de } J \text{ alimentados}}$$

8

$$X_j \equiv \frac{\text{Moles de J en alimentación} - \text{Moles de J}}{\text{Moles de J en alimentación}}$$

9

CONVERSIÓN FRACCIONAL: X_j

En sistemas discontinuos:

$$X_j \equiv \frac{(N_{j_0} - N_j)}{N_{j_0}}$$

$$X_j = \frac{-v_j \cdot \xi}{N_{j_0}}$$

Cuando hay reactivo limitante:
 X_j se expresa para el reactivo limitante

10

VELOCIDAD DE REACCIÓN

EXTENSIVA

$$R \equiv \frac{\text{moles que reaccionan}}{\text{tiempo}}$$

INTENSIVA

1) Homogénea

$$r = \frac{R}{V}$$

11

2) Heterogéneas:

EJEMPLOS:

Sistema sólido-fluido:

$$r' = \frac{R}{W} \quad \text{W: masa de sólido}$$

Sistema fluido-fluido:

$$r'' = \frac{R}{S} \quad \text{S: superficie de interfase}$$

12

$$\frac{1}{|v_j|} \cdot r_j = \frac{1}{|v_s|} \cdot r_s$$

13

REACCIONES HOMOGÉNEAS

$$r = f(T, P, \text{composición}) = f(T, P, C_1, C_2, \dots, C_S)$$

SIMPLES:

$$r = f_1(T) \cdot f_2(C_1, C_2, \dots, C_S)$$

$$r = k \cdot C_A^\alpha \cdot C_B^\beta$$

$\alpha + \beta = n$, orden de reacción

$$k [=] (\text{concentración})^{1-n} \cdot (\text{tiempo})^{-1}$$

14

•Elemental

•Reversible:

$$r = k_d \prod C_j^{v_{dj}} - k_i \prod C_j^{v_{ij}}$$

•Gases:

$$r = k_p \cdot P_A^\alpha \cdot P_B^\beta$$

$k_p [=] (\text{tiempo})^{-1} (\text{concentración}) (\text{presión})^{-n}$

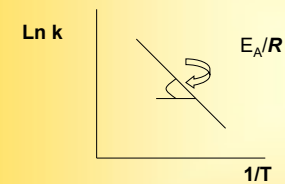
$$k_c = (RT)^n \cdot k_p$$

15

EFFECTO DE LA TEMPERATURA

$$\text{ECUACIÓN DE ARRHENIUS : } k = k_o \cdot e^{-\frac{E_A}{RT}}$$

(determinada experimentalmente)



$T [=] ^\circ\text{K}$

$R = \text{Constante de los gases} = 8.314 \text{ J / (mol} \cdot ^\circ\text{K)} = 1.987 \text{ cal / (mol} \cdot ^\circ\text{K)}$

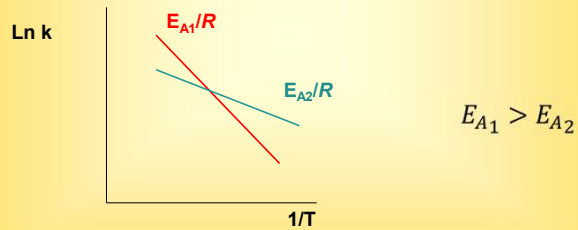
$E_A = \text{Energía de activación}$

$k_o = \text{Factor de frecuencia}$

16

EFFECTO DE LA TEMPERATURA

ECUACIÓN DE ARRHENIUS : $k = k_0 \cdot e^{-\frac{E_A}{R \cdot T}}$



17

INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA DETERMINADA POR E_A Y NIVELES TERMICOS:

- E_A grande \Rightarrow r sensible a T
- E_A pequeña \Rightarrow r poco sensible a T
- Efecto de T a T baja > a T alta

18

$$k_T = k_0 \cdot e^{-\frac{E_A}{R \cdot (T)}}$$

$$k_{(T+10)} = k_0 \cdot e^{-\frac{E_A}{R \cdot (T+10)}}$$

$$\frac{k_{(T+10)}}{k_T} = \frac{k_0 \cdot e^{-\frac{E_A}{R \cdot (T+10)}}}{k_0 \cdot e^{-\frac{E_A}{R \cdot (T)}}} = e^{-\frac{E_A}{R} \cdot \left(\frac{1}{T+10} - \frac{1}{T}\right)}$$

Ejemplo:

$$E_A = 160 \text{ kJ/mol}$$

$$T = 20^\circ\text{C} \rightarrow \frac{k_{303}}{k_{293}} = 8,7$$

$$T = 600^\circ\text{C} \rightarrow \frac{k_{883}}{k_{873}} = 1,6$$

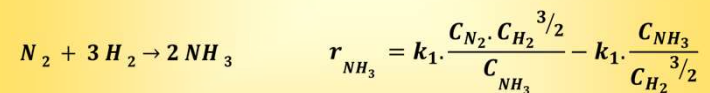
19

ECUACIÓN DE LA VELOCIDAD Efecto de la concentración

SIMPLE:

$$\begin{aligned} r_A &= k \cdot C_A \\ r_A &= k \cdot C_A^n \\ r_A &= k \cdot C_A \cdot C_B \end{aligned}$$

COMPLEJA:



20