CLASIFICACIÓN DE REACTORES

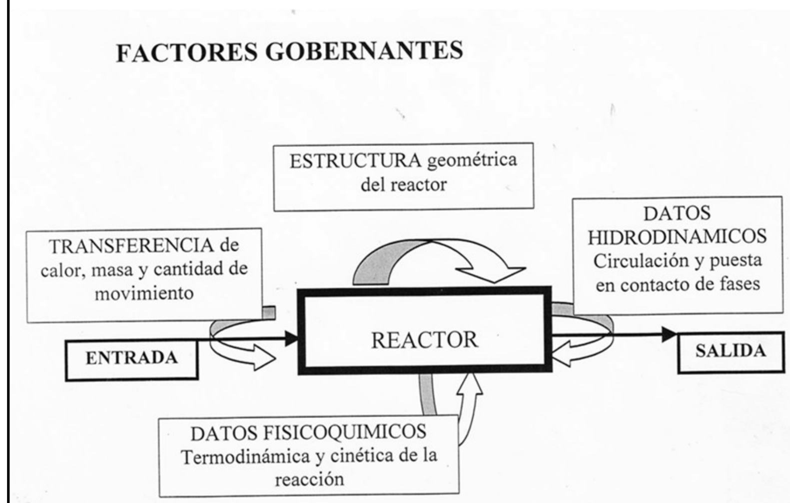
CRITERIOS → **TIPOS**

- circulación de la mezcla reaccionante ⇒ **- reactor cerrado**, **- reactor semicerrado**, **- reactor abierto**

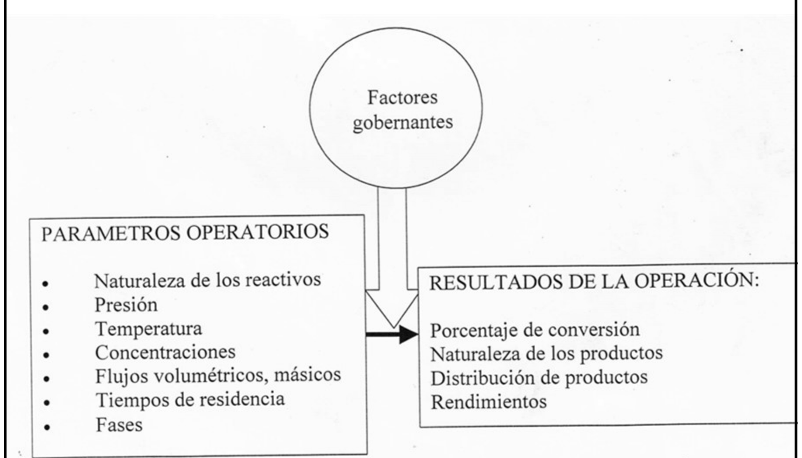
- grado de mezcla, casos extremos ⇒ **- RCA**, **- RTFP**

1

FUNCIONAMIENTO DE UN REACTOR QUÍMICO

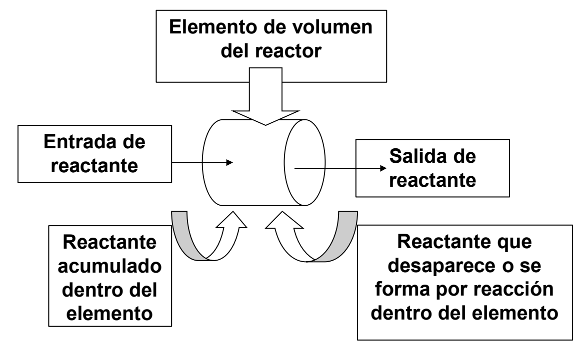


2



3

BALANCE DE MATERIA



(Velocidad de acumulación del reactante) = (Velocidad de entrada del reactante) - (Velocidad de salida del reactante) + o - (Velocidad de formación o desaparición del reactante)

4

REACTORES IDEALES

- Reactor Discontinuo
- Reactor Tubular Flujo Pistón
- Reactor Continuo Agitado

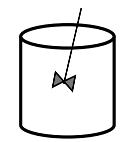
5

REACTOR IDEAL DISCONTINUO (RDA)

- Composición y temperatura uniformes en cada instante
- Durante la reacción no entra ni sale fluido del reactor

$$\cancel{\begin{pmatrix} Velocidad\ de \\ entrada\ del \\ reactante \end{pmatrix}} - \cancel{\begin{pmatrix} Velocidad\ de \\ salida\ del \\ reactante \end{pmatrix}} + ó - \begin{pmatrix} Velocidad\ de \\ formación\ ó \\ desaparición \\ del\ reactante \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Velocidad\ de \\ acumulación \\ del\ reactante \end{pmatrix}$$

$$\pm r_j . V = \frac{dN_j}{dt}$$



$$\pm r_j = \frac{1}{V}\frac{dN_j}{dt} = \frac{1}{V}\frac{d(C_j . V)}{dt} = \frac{1}{V}\left[V . \frac{dC_j}{dt} + C_j . \frac{dV}{dt}\right]$$

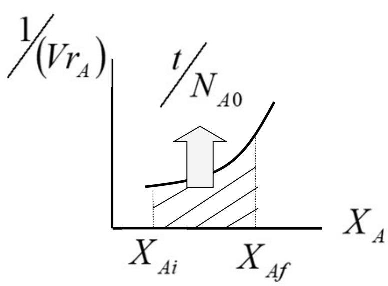
Si la densidad o el volumen es constante: $\pm r_j = \frac{dC_j}{dt}$

6

BM reactivo A:

$$(r_A) . V = -\frac{dN_A}{dt} = -\frac{d\left[N_{A_0} . (1 - X_A)\right]}{dt} = N_{A_0} . \frac{dX_A}{dt}$$

$$t = N_{A_0} . \int_{X_{A_i}}^{X_{A_f}} \frac{dX_A}{r_A . V}$$

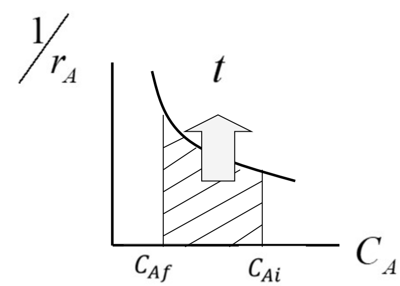


7

$\boldsymbol{\rho = cte}$

$$t = C_{A_0} . \int_{X_{A_i}}^{X_{A_f}} \frac{dX_A}{r_A}$$

$$t = -\int_{C_{A_i}}^{C_{A_f}} \frac{dC_A}{r_A}$$



8

EDETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DE LA VELOCIDAD DE REACCIÓN: C vs t

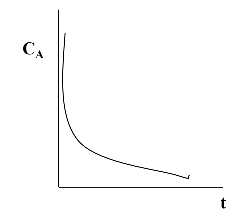
1) ***MÉTODO INTEGRAL***

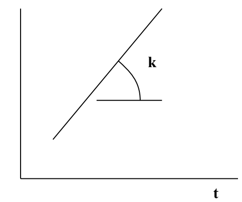
a) **Proponer ecuación**
b) **Se inserta**
c) **Se integra**
d) **Se compara C vs. t producida con experimentos**

$$r_A = -\frac{dC_A}{dt} = f(k, C_A) = k\ f(C_A)$$

$$-\int_{C_0}^{C} \frac{dC_A}{f(C_A)} = kt$$

9





10

2) ***MÉTODO DIFERENCIAL***

$r_{observada}$ vs $r_{predicha}$

a) Ecuación cinética completa

i) Supone ecuación cinética $r_A = k.\ f(C)$

ii) r_A se calcula de curva experimental: $r_A = -\ dC_A / dt$

iii) Se evalúa $-\ dC_A / dt$ vs. $f(C)$

11

b) Diferentes partes

-Ausencia de ciertos componentes

-Velocidades iniciales

-Componentes en exceso

12

3) *MÉTODO DE LOS PERÍODOS DE SEMI - REACCIONES*

$$t_{1/2} \quad cuando \quad \frac{C_A}{C_{A_0}} = \frac{1}{2}$$

- Se puede combinar con reactivo en exceso
- Relación estequiométrica → orden global

$$aA + bB \rightarrow \ \ldots\ldots\ldots$$

$$r_A = k.C_A{}^{\alpha}.C_B{}^{\beta}$$

$$\frac{C_B}{C_A} = \frac{b}{a}$$

$$n = \alpha + \beta$$

$$r_A = k'.C_A{}^{n}$$

$$k' = k.\left({}^{b}/_{a}\right)^{\beta}$$

$$n \neq 1: C_A{}^{1-n} - C_{A_0}{}^{1-n} = k'.(n-1).t \Rightarrow t_{1/2} = \frac{2^{n-1}-1}{k'.(n-1)}.C_{A_0}{}^{1-n}.$$

$$n = 1: t_{1/2} = \frac{ln2}{k}$$

13

14

FLUJO MOLAR: F_j

$$[F_j] = \frac{moles}{tiempo}$$

FLUJO VOLUMETRICO (CAUDAL): v

$$[v] = \frac{volumen}{tiempo}$$

15

CONVERSIÓN FRACCIONAL: X_j

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

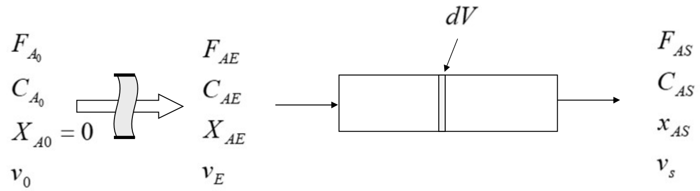
$$X_A \equiv \frac{Moles\ de\ A\ en\ alimentación\ - Moles\ de\ A}{Moles\ de\ A\ en\ alimentación}$$

$$X_A = \frac{F_{A_0} - F_A}{F_{A_0}}$$

16

REACTOR TUBULAR FLUJO PISTÓN (TFPI)

- ✓**Flujo ordenado**
- ✓**No hay mezcla en dirección del flujo**
- ✓**El tiempo de residencia es el mismo para todos los elementos del fluido**



17

BALANCE DE MASA - RTFPI

En un diferencial volumen (dV):

$$\begin{bmatrix} Velocidad\ de \\ acumulación \\ del\ reactante \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Flujo\ de \\ entrada\ del \\ reactante \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Flujo\ de \\ salida\ del \\ reactante \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} Velocidad\ de \\ formación\ o \\ consumo \\ del\ reactante \end{bmatrix}$$

$$\frac{dN_j}{dt} = F_j - (F_j + dF_j) \pm r_j.dV$$

Suponemos estado estacionario: $\boldsymbol{\frac{dN_j}{dt} = 0}$

$$0 = F_j - (F_j + dF_j) \pm r_j.dV$$

<u>*Para A reactivo*</u>:

$$0 = F_A - (F_A + dF_A) - r_A.dV$$

$$-dF_A = r_A dV$$

$$dF_A = -F_{A_0} dX_A$$

$$F_{Ao} dX_A = r_A dV$$

18

BALANCE DE MASA - RTFPI

En un volumen (ΔV):

$$\begin{bmatrix} Velocidad\ de \\ acumulación \\ del\ reactante \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Flujo\ de \\ entrada\ del \\ reactante \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Flujo\ de \\ salida\ del \\ reactante \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} Velocidad\ de \\ formación\ o \\ consumo \\ del\ reactante \end{bmatrix}$$

$$\frac{dN_j}{dt} = F_j\Big|_V - F_j\Big|_{V+\Delta V} \pm r_j.(\Delta V)$$

Suponemos estado estacionario: $\boldsymbol{\frac{dN_j}{dt} = 0}$

$$0 = F_j\Big|_V - F_j\Big|_{V+\Delta V} \pm r_j.\Delta V$$

Para A reactivo: $0 = F_A\Big|_V - F_A\Big|_{V+\Delta V} - r_A.\Delta V$

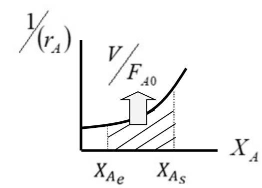
$$\lim_{\Delta V \to 0} \frac{F_A|_{V+\Delta V} - F_A|_V}{\Delta V} = -r_A \qquad \frac{dF_A}{dV} = -r_A \to -dF_A = r_A dV$$

19

<u>*Ejemplo:*</u>
Para *reacciones tipo*
$r_A = k.C_A{}^n;\ n > 0$

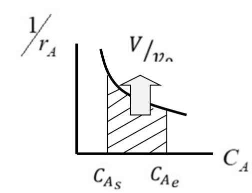
$$\int_{X_{A_e}}^{X_{A_s}} \frac{dX_A}{r_A} = \int_0^V \frac{dV_{RTFPI}}{F_{A0}}$$

$$\frac{V_{RTFP}}{F_{A0}} = \int_{X_{A_e}}^{X_{A_s}} \frac{dX_A}{r_A}$$



$\rho = cte \quad \varepsilon = 0$

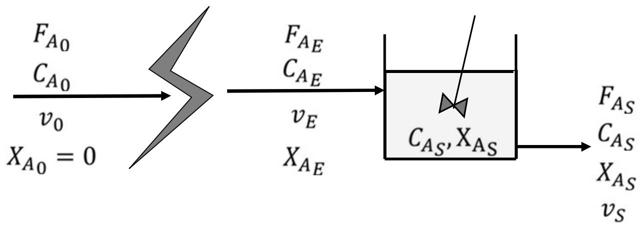
$$\frac{V_{RTFPI}}{F_{A0}} = -\frac{1}{C_{A0}} \int_{C_{A_e}}^{C_{A_s}} \frac{dC_A}{r_A}$$



20

REACTOR DE MEZCLA COMPLETA O REACTOR CONTINUO AGITADO IDEAL (RCAI)

✓Todas las propiedades (ejemplo: <u>concentración</u>, <u>temperatura, presión)</u> son <u>uniformes</u> en el reactor
✓La reacción tiene lugar a concentraciones y temperaturas únicas.
✓Todas las propiedades (ejemplo: composición, temperatura) de la corriente de salida son las mismas que las de operación del reactor



21

BALANCE DE MASA

$$\begin{bmatrix} Velocidad \\ de\ acumulación \\ del\ reactante \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Flujo\ de \\ entrada\ del \\ reactante \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Flujo\ de \\ salida\ del \\ reactante \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} Velocidad\ de \\ formación\ o\ consumo \\ del\ reactante \end{bmatrix}$$

En estado estacionario

$$0 = F_{A0} - F_{A0}(1 - X_A) \pm r_A\big|_{salida} V \quad :$$

$$F_{A0}X_A = r_A\big|_{salida} V$$

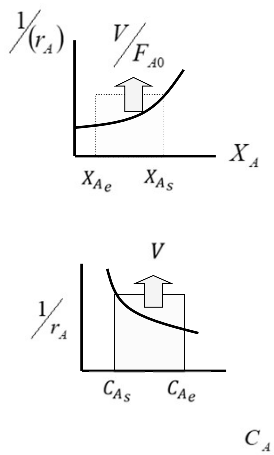
Generalizando para $C_{AE} \neq C_{A0}$ o $X_{AE} \neq 0$

$$F_{A0}\Delta X_A = r_A\big|_{salida} V \longrightarrow \frac{V}{F_{A0}} = \frac{\Delta X_A}{r_A|_{salida}}$$

$\rho = cte$

$$\frac{V}{F_{Ao}} = \frac{C_{AE} - C_A}{C_{A0} r_A|_{salida}} = -\frac{\Delta C_A}{C_{A0} r_A|_{salida}} \rightarrow \frac{V}{v_o} = -\frac{\Delta C_A}{r_A|_{salida}}$$

22



23

TIEMPO ESPACIAL (τ)

$$\tau \equiv \frac{V}{v_0}$$

Si v_o es el caudal de entrada al reactor,
τ es el tiempo necesario para tratar un volumen de alimentación igual al volumen del reactor

$[\tau] =$ Tiempo

$$\tau = \frac{C_{A0}V}{F_{A0}} = \frac{V}{v_0} = \frac{V}{F_{A0}/C_{A0}}$$

24

VELOCIDAD ESPACIAL (s)

s ≡ número de volúmenes de alimentación en condiciones determinadas que puede tratarse en la unidad de tiempo, medidos en volumen del reactor

[s] = tiempo $^{-1}$

$$s = \frac{1}{t} = \frac{v_0}{V}$$

25

$$\rho = \text{cte.} \quad ; \quad \varepsilon = 0$$

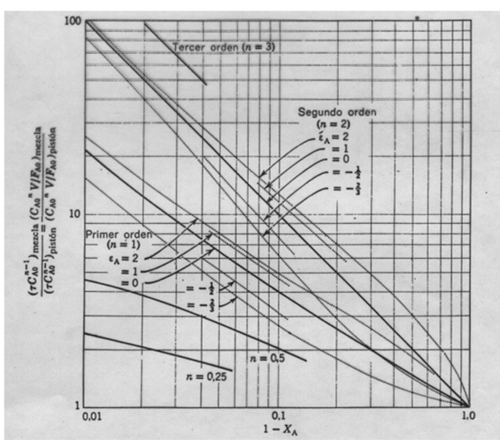
$$\frac{\left(\tau . C_{A_0}{}^{n-1}\right)_{RCAI}}{\left(\tau . C_{A_0}{}^{n-1}\right)_{RTFPI}} = \frac{\left|\dfrac{X_A}{(1-X_A)^n}\right|_{RCAI}}{\left|\dfrac{(1-X_A)^{1-n}-1}{n-1}\right|_{RTFPI}} \qquad n \neq 1$$

$$\frac{\left(\tau . C_{A_0}{}^{n-1}\right)_{RCAI}}{\left(\tau . C_{A_0}{}^{n-1}\right)_{RTFPI}} = \frac{\tau_{RCAI}}{\tau_{RTFPI}} = \frac{\left|\dfrac{X_A}{(1-X_A)}\right|_{RCAI}}{\left|-L_n(1-X_A)\right|_{RTFPI}} \qquad n = 1$$

26

Comparación RTFP - RCA

$$r_A = kC_A{}^n$$



27