

# ENGINYERIA DE LA REACCIÓ QUÍMICA-UAB-ETI

## **Tema 1. Estequiometria.**

- 1.1. Definició d'estequiometria i altres conceptes importants.
- 1.2. Definicions i nomenclatura.
- 1.3. Mesures de la quantitat i composició.
- 1.4. Canvis en la composició deguts a la reacció química.
- 1.5. Altres conceptes importants.
- 1.6. Velocitat de reacció.

## **Tema 2. Termoquímica i equilibri químic.**

- 2.1. Introducció.
- 2.2. Equilibri químic.
- 2.3. Càlcul de la constant d'equilibri.
- 2.4. Variació de la constant d'equilibri amb la temperatura.
- 2.5. Altres formes de la llei d'equilibri.
- 2.6. Càlcul de la composició a l'equilibri.
- 2.7. Diagrames d'equilibri.

## **Tema 3. Cinètica aplicada.**

- 3.1. Introducció.
- 3.2. Cinètica homogènia.
  - 3.2.1. Factor depenent de la concentració.
  - 3.2.1. Factor depenent de la temperatura.
  - 3.2.3. Efecte de la temperatura en al velocitat de reacció.
  - 3.2.4. Obtenció i anàlisi de les dades cinètiques.
    - 3.2.4.1. Mètode diferencial.
    - 3.2.4.2. Mètode integral.
    - 3.2.4.3. Mètode de les velocitats inicials.
    - 3.2.4.4. Mètode de la vida o període mig.
    - 3.2.4.5. Comparació entre mètodes.
- 3.3. Cinètica i catàlisis heterogènia.
  - 3.3.1. Equacions cinètiques.
  - 3.3.2. Etapa controlant.
  - 3.3.3. Efecte de la difusió interna.
  - 3.3.4. Transferència de matèria externa.
  - 3.3.5. Alguns consells per superar els problemes de D.I. i T.M.E.

## **Tema 4. Disseny de reactors ideals isoterms.**

- 4.1. Balanç d'energia calorífica.
  - 4.1.1. Balanç d'energia calorífica en estat estacionari. Reactors continus.
  - 4.1.2. Balanç d'energia calorífica en estat no estacionari. Reactors discontinus.
- 4.2. Reactor continu de tanc agitat (RCTA).
  - 4.2.1. Balanç de matèria. Equació de disseny.
  - 4.2.2. Arrencada d'un RCTA.
  - 4.2.3. Seqüències de RCTA's.
  - 4.2.4. Bescanvi de calor.
- 4.3. Reactor continu de flux en pistó (RCFP).
  - 4.3.1. Balanç de matèria. Equació de disseny.
  - 4.3.2. Seqüències de RCFP's.
  - 4.3.3. Bescanvi de calor.
  - 4.3.4. Pèrdues de pressió.
- 4.4. Reactor discontinu de tanc agitat (RDTA).
  - 4.4.1. Balanç de matèria. Equació de disseny.
  - 4.4.2. Bescanvi de calor.
- 4.5. Seqüències de RCTA i RCFP alternats.

- 4.6. Comparació de reactors isoterms.
  - 4.6.1. Reacció única.
  - 4.6.3. Reaccions múltiples.

### **Tema 5. Disseny de reactors adiabàtics.**

- 5.1. Introducció.
- 5.2 RCTA.
  - 5.2.1. Equació de disseny.
  - 5.2.2. Temperatura d'aliment en l'operació adiabàtica.
  - 5.2.3. Disseny d'un RCTA adiabàtic.
  - 5.2.4. Seqüències de RCTA's adiabàtics.
- 5.3. RCFP.
  - 5.3.1. Equació de disseny.
  - 5.3.2. Seqüències de RCFP
- 5.4. RDTA.
  - 5.4.1. Equació de disseny.

### **Tema 6. Disseny de reactors intermedis.**

- 6.1. Introducció.
- 6.2. RCTA's intermedis.
  - 6.2.1. Equació de disseny.
  - 6.2.2. Multiplicitat de l'estat estacionari.

### **Tema 7. Reactors no ideals. DTR.**

- 7.1. Introducció.
- 7.2. Determinació de la distribució de temps de residència o DTR.
- 7.3. Respostes dels diferents reactors a injeccions de traçador.
  - 7.3.1. Injecció en impuls.
  - 7.3.2. Injecció en esglaió.
- 7.4. Models de flux.
  - 7.4.1. Model de dispersió axial.
  - 7.4.2. Model de tancs en sèrie.
  - 7.4.3. Models compartimentats.
- 7.5. Càlcul del temps de residència mig i de la conversió a partir de la DTR.

### **Bibliografia**

- Scott Fogler, H. "Elements of Chemical Reaction Engineering". 3<sup>nd</sup> ed. Prentice Hall (1998).
- Levenspiel, O. "Ingeniería de las reacciones químicas". 2<sup>a</sup> ed. Editorial Reverté (1996).
- Aris, R. "Elementary Chemical Reactor Analysis". Prentice Hall (1969) (traducción al castellano: Alhambra, Madrid, 1973).

**Avaluació de l'assignatura:** Examen (mínima nota de la part de teoria: 40)-90% i un 10% dels problemes lliurats a classe.