

ASSIGNATURA: ENGINYERIA DE LA REACCIÓ QUÍMICA

Codi: 24660

Tipus Assign.: Tr
Crèdits Totals: 6

Curs: 2006-2007
Teor.: 4,5

Quad.: 1
Prob.: 1,5

Departament: Enginyeria Química

Curs acadèmic: 2006/2007

Professors: Antoni Sánchez/Sergio Ponsá; email: antoni.sanchez@uab.cat/sergio.ponsa@uab.es

Objectius de l'assignatura:

1. Recordar les bases estequiomètriques, termodinàmiques i cinètiques de les reaccions químiques des d'un punt de vista enginyeril.
2. Descriure les característiques principals dels reactors químics i la seva tipologia.
3. Dissenyar reactors químics.
4. Interpretar els models de flux dels reactors químics

Assignatures que es recomana haver cursat prèviament:

Balanços en processos químics

Programa:

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.
-

Sistema d'avaluació:

Programa d'activitats

Part 1: Temes 1, 2 i 3:

1) **Classes presencials:** 12 h
Feina per part de l'alumnat: 24 h

2) Activitats avaluable:

Activitat 1.1 (individual): Tria d'un reacció química industrial i definició de les propietats estequiomètriques, termodinàmiques i cinètiques.

Feina per part de l'alumnat: 5 h
Presentació i discussió a classe: 1 h

Part 2: Temes 4, 5 i 6:

1) **Classes presencials:** 36 h
Feina per part de l'alumnat: 72 h

2) Activitats avaluable:

Activitat 2.1 (en grup): Elaboració d'un problema del tema 4 i resolució a classe. Avaluació entre iguals.

Feina per part de l'alumnat: 5 h
Resolució a classe: 2 h

Activitat 2.2 (en grup): Elaboració d'un problema del tema 5 o 6 i resolució a classe. Avaluació entre iguals.

Feina per part de l'alumnat: 5 h

Resolució a classe: 2 h

Part 3: Tema 7:

1) **Classes presencials:** 12 h

Feina per part de l'alumnat: 24 h

2) **Activitats avaluables:**

Activitat 3.1 (en grup): Interpretació de les dades d'una DTR real, presentació a classe i discussió.

Feina per part de l'alumnat: 5 h

Presentació i discussió a classe: 2 h

Avaluació de l'assignatura:

Examen: 50%

Activitats: 50%

- Activitat 1.1: 10%
- Activitat 2.1: 10%
- Activitat 2.2: 10%
- Activitat 3.1: 10%
- Altres activitats: 10%

Bibliografia:

Scott Fogler, H. "Elements of Chemical Reaction Engineering". 4th ed. Prentice Hall (2005).

Scott Fogler, H. "Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas". 3a ed. Prentice Hall (2001).

Levenspiel, O. "Chemical reaction engineering". 3a ed. Wiley (1998).

Levenspiel, O. "Ingeniería de las reacciones químicas". 3a ed. Editorial Reverté (2004).

Aris, R. "Elementary Chemical Reactor Analysis". Prentice Hall (1969).

(traducció al castellà: Alhambra, Madrid, 1973).