

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                  |                                 |                              |                                             |              |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|---------------------------------|------------------------------|---------------------------------------------|--------------|
| FACULTAD: INGENIERÍA                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                  | ESCUELA: INGENIERÍA QUÍMICA.    |                              | DEPARTAMENTO: DISEÑO Y CONTROL DE PROCESOS. |              |
| ASIGNATURA: Procesos Catalíticos.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                  |                                 | CÓDIGO: 5462                 |                                             | PAG: 1 DE: 5 |
| REQUISITOS: CINETICA (5313).                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                  |                                 |                              | UNIDADES: 4                                 |              |
| HORAS                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                  |                                 |                              |                                             |              |
| TEORÍA                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | PRÁCTICA         | TRABAJO SUPERVISA.              | LABORATORIO                  | SEMINARIO                                   |              |
| 4                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                  |                                 |                              |                                             |              |
| <p><b>PROPÓSITO:</b></p> <p>La importancia de los procesos catalíticos está fuera de toda discusión. Para el análisis y diseño de tales procesos especialmente en el caso de catálisis heterogénea, es necesario un conocimiento especializado sobre el tema.</p> <p>El propósito del curso es desarrollar tales conocimientos de modo que, integrados a los conocimientos de orden más generales, permitan al estudiante desenvolverse en esta área de tanta importancia en la industria química.</p> <p><b>OBJETIVOS DE APRENDIZAJE:</b></p> <p>Al finalizar el curso el estudiante deberá ser capaz de:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Realizar balances de masa y energía, independientemente de la complejidad del sistema.</li> <li>2. Determinar la factibilidad termodinámica de un proceso y el estado de equilibrio.</li> <li>3. Formular y analizar modelos cinéticos para diversos tipos de reacciones catalíticas especialmente en sistemas gas-sólido.</li> <li>4. Determinar que propiedades físicas deben conocerse para catalizadores porosos y los métodos disponibles para su determinación.</li> </ol> |                  |                                 |                              |                                             |              |
| FECHA:                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | No. EMISION<br>2 | PERIODO VIGENTE:<br>SEM 01/1997 | ULTIMO PERIODO<br>2015       | PROFESOR:                                   |              |
| JEFE DE DPTO.<br>V. ROCCARO                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | FIRMA JEFE DEPT: | APROB.C. ESC.<br>09 NOV 1996    | APROB.C. FAC.<br>28 ENE 1997 | DIRECTOR:<br>J. PAPA                        |              |

**EVALUACIÓN:**

- |                                                                                                            |      |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|
| 1. Examen Parcial.                                                                                         | 20%  |
| Evaluación de los 2 primeros objetivos (Objetivos a y b).                                                  |      |
| 2. Examen Parcial.                                                                                         | 20%  |
| Evaluación del Objetivo c.                                                                                 |      |
| 3. Examen Parcial.                                                                                         | 40%  |
| Evaluación de los Objetivos d y e.                                                                         |      |
| 4. Práctica.                                                                                               | 20%  |
| Evaluación de informes y de ejecución de tareas especiales.                                                |      |
| 5. Reparación.                                                                                             | 100% |
| Se evaluarán todos los objetivos, y para tener derecho ello, deberán presentar al menos un examen parcial. |      |

**CONTENIDO:****PROGRAMA SINÓPTICO:**

Tema 1. Introducción – objetivos, metodología.

Tema 2. Balance de materia y estequiometría.

Tema 3. Balance de energía y equilibrio químico.

Tema 4. Cinética de reacciones catalíticas en sistemas heterogéneas.

Tema 5. Transferencia de materia y energía en una pastilla de catalizador.

Tema 6. Propiedades físicas de un catalizador poroso.

**PROGRAMA DETALLADO:****Tema 1. Introducción – Objetivos, Metodología.**

- Estado del conocimiento actual.
- Problemas ingenieriles en procesos catalíticos.
- Objetivos y limitaciones del curso.
- Metodología de estudio.

**Tema 2. Balance de Materia y Estequiometría.**

- Introducción.
- Ecuación de un sistema abierto.
- Independencia de reacciones químicas.
- Determinación de la matriz de coeficientes estequiométricos.
- Ejemplo de la aplicación.
- Balance de materia.
- Planteo de las relaciones.
- Componentes guía.
- Cambio de composición por efectos de las reacciones químicas.

**Tema 3. Balance de Energía y Equilibrio Químico.**

- Ecuación general de balance.
- Aplicación al caso específico de reactores químicos.

- Obtención de la ecuación general.
- Ejemplo de aplicación.
- Equilibrio químico.
- Condiciones para especificarlo (regla de Duhen y Gibbs).
- Cálculo de la composición equilibrio.
- Sistemas homogéneas y heterogéneas.

#### **Tema 4. Cinética de Reacciones Catalíticas en Sistemas Heterogéneas.**

- Introducción.
- Conceptos generales.
- Concepto de estado estacionario, Método de Chistiasen para cinética cuasi – lineal.
- Expresión global de la velocidad de reacción.
- Mecanismos cíclicos y en cadena.
- Implicación de la suposición de estado estacionario.
- Reacciones heterogénicas simples.
- Concepto de etapas determinante.
- Ambigüedad de la expresión cinética simplificada.
- Sistemas de reacción heterogéneos complejos.
- Reacciones catalíticas en serie y en paralelo.
- Actividad y selectividad de catalizadores polifuncionales.
- Ejemplos típicos.
- Actividad y selectividad.
- Principios de Sabatier.

#### **Tema 5. Transferencia de Materia y Energía en una Pastilla de Catalizador.**

- Introducción.
- Ecuaciones generales de balance.
- Necesidad de definir el factor de efectividad y Evaluación del mismo.
- Generalidades.
- Análisis dimensional de las ecuaciones.
- Reacciones simples.
- Efecto de la geometría en una reacción de primer orden.
- Reacción de orden arbitrario.
- Criterios prácticos para la evaluación del efecto difuncional interno.
- Análisis de reacciones complejas.
- Expresiones cinéticas del tipo Lagmuir Minschelwood.
- Soluciones asintóticas para el factor de efectividad.
- Reacciones reversibles.
- Temperatura mínima de una pastilla de catalizador.
- Influencia de los distintos parámetros adimensionales.
- Soluciones exactas y aproximadas.
- Criterios prácticos.

- Desactivación de la superficie catalítica.
- Influencia de las propiedades de transporte en la selectividad.

#### **Tema 6. Propiedades Físicas de un Catalizador Poroso.**

- Introducción.
- Adsorción física y química.
- Isotermas de adsorción.
- Modelo Bet (Brunauer, Emmett y Teller).
- Clasificación de las isotermas.
- Superficie específica. Su determinación.
- Estimación de la distribución de tamaños de poros.
- Ejemplo. Discusión de los resultados.
- El porosímetro de mercurio.
- Estructura micro y macro porosa.
- Conclusiones.
- Estimación de la difusividad y de la conductividad térmica efectiva.
- Mecanismo molecular y Kundsén.

#### **REQUISITOS.**

1. Formales: Haber aprobado Cinética.
2. Académicos: El alumno deberá tener conocimientos sobre:
  - a) Resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias.
  - b) Operaciones con matrices.
  - c) Termodinámica del equilibrio.
  - d) Química orgánica.
  - e) Cinética química.
  - f) Diseño de reactores.

#### **HORAS DE CONTACTO:**

La asignatura tiene dos (2) sesiones de teoría: Una de dos (2) horas y otra de una (1) hora. Y una sesión de práctica de una hora.

#### **PROGRAMACIÓN CRONOLOGICA.**

|               |            |
|---------------|------------|
| Tema 1 y 2    | 2 semanas. |
| Objetivo (a). |            |
| Tema 3        | 2 semanas. |
| Objetivo (b). |            |
| Tema 4        | 4 semanas. |
| Objetivo (c). |            |
| Tema 5        | 5 semanas  |
| Objetivo (d). |            |
| Tema 6        | 3 semanas. |
| Objetivo (e). |            |

## **BIBLIOGRAFÍA:**

No existen libros de textos en castellano de nivel aceptable. El profesor posee material escrito suficiente.

### **Textos:**

- 📖 Aris, R. "**Elementary Chemical Reactors Analysis**". Prentice Hall.
- 📖 Healy & Rosen. "**Cálculo de Balances de Materia y Energía**".
- 📖 Petersen. E.E., "**Chemical Reaction Analysis**". Prentice Hall.
- 📖 Bondar. M., "**Kinetics of Chemical Prodes**". Prentice Hall.
- 📖 Froment, G. F., And Biscoff K. B., "**Chemical Reactor Analisis and Desing Wiley**" (1979).

### **Libros Consulta:**

- 📖 Carberry, J.J., "**Chemical and Catalytic Reaction Engineering**". Mc Graw Hill Co. (1976).
- 📖 Hougen, Watson and Ragatz. "**Chemical Process Principles**". Tomo III.