



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN  
PLAN DE ESTUDIOS DE LA LICENCIATURA  
EN INGENIERÍA QUÍMICA**



<b>PROGRAMA DE LA ASIGNATURA DE:</b>				
<b>REACTORES QUÍMICOS HETEROGÉNEOS</b>				
<b>IDENTIFICACIÓN DE LA ASIGNATURA</b>				
<b>MODALIDAD:</b>	Curso			
<b>TIPO DE ASIGNATURA:</b>	Teórica			
<b>SEMESTRE EN QUE SE IMPARTE:</b>	Octavo			
<b>CARÁCTER DE LA ASIGNATURA:</b>	Obligatoria			
<b>NÚMERO DE CRÉDITOS:</b>	8			
<b>HORAS A LA SEMANA:</b>	4	<b>Teóricas:</b> 4	<b>Prácticas:</b> 0	<b>Semanas de clase:</b> 16
				<b>TOTAL DE HORAS:</b> 64
<b>SERIACIÓN:</b>	Si ( X )	No ( )	Obligatoria ( X )	Indicativa ( )
<b>SERIACIÓN ANTECEDENTE:</b>	Reactores Químicos Homogéneos y Seriación por bloques. Haber aprobado por lo menos el 80% de las asignaturas de los 6 primeros semestres			
<b>SERIACIÓN SUBSECUENTE:</b>	Ninguna			

**OBJETIVO GENERAL**

Al finalizar el curso el alumno deberá ser capaz de:

- Aplicar los modelos matemáticos de la cinética química y los balances infinitesimales de materia y energía para el diseño y especificación de las condiciones de operación de reactores reales, tomando en cuenta las desviaciones hidrodinámicas del flujo ideal.
- Explicar los mecanismos de la catálisis homogénea y heterogénea, construir los modelos matemáticos correspondientes a cada una de sus etapas, identificar la etapa controlante de la velocidad de reacción y diseñar reactores en los que se lleven a cabo reacciones catalizadas.

<b>ÍNDICE TEMÁTICO</b>			
<b>UNIDAD</b>	<b>TEMAS</b>	<b>Horas Teóricas</b>	<b>Horas prácticas</b>
1	Introducción a la ingeniería de reactores heterogéneos	6	0
2	Efecto de la difusión en reacciones heterogéneas	8	0
3	Diseño de reactores catalíticos de lecho empacado	6	0
4	Diseño de reactores de lecho fluidizado y con sólidos en suspensión	8	0
5	Diseño de reactores con reacciones	8	0

	gas/líquido sobre catalizadores sólidos		
6	Desactivación de catalizadores	8	0
7	Diseño de reactores con reacciones fluido/fluido	8	0
8	Diseño de reactores con reacciones no catalíticas fluido-partícula sólida	6	0
9	Diseño de biorreactores	6	0
	Total de Horas Teóricas	64	
	Total de Horas Prácticas		0
	Total de Horas		64

## CONTENIDO TEMÁTICO

---

### 1. INTRODUCCIÓN A LA INGENIERÍA DE REACTORES HETEROGÉNEOS

- 1.1. Concepto de reacción heterogénea
- 1.2. Tipos de reacciones heterogéneas
- 1.3. Reacciones catalíticas
- 1.4. Etapas en una reacción catalítica
  - 1.4.1. Etapa 1: Difusión desde el seno del fluido hacia la superficie externa del catalizador
  - 1.4.2. Etapa 2: Difusión interna
  - 1.4.3. Etapa 3: Adsorción
  - 1.4.4. Etapa 4: Reacción
  - 1.4.5. Etapa 5: Desorción de productos
  - 1.4.6. Etapa 6: Difusión de productos
  - 1.4.7. Paso Limitante
- 1.5. Formulación de modelos para velocidad de reacción deducidas a partir de la hipótesis de estado pseudoestacionario
- 1.6. Dependencia de la ecuación de velocidad con la temperatura
- 1.7. Análisis de datos para el diseño de reactores heterogéneos
  - 1.7.1. Modelo de velocidad de reacción a partir de datos experimentales
  - 1.7.2. Proposición de mecanismos de reacción
  - 1.7.3. Evaluación de parámetros del modelo de velocidad
  - 1.7.4. Diseño del reactor
- 1.8. Ejemplos
- 1.9. Ejercicios

### 2. EFECTO DE LA DIFUSIÓN EN REACCIONES HETEROGÉNEAS.

- 2.1. Resistencia externa a la transferencia de masa
  - 2.1.1. Reacciones limitadas por la transferencia de masa en lechos empacados
  - 2.1.2. Reacciones limitadas por transferencia de masa en superficies metálicas
- 2.2. Efectos térmicos. Reacción en el interior de partículas no isotérmicas

- 2.3. Difusión y reacción en partículas esféricas de catalizador poroso
  - 2.3.1. Difusividad efectiva
  - 2.3.2. Deducción de la ecuación diferencial que describe la difusión y la reacción
  - 2.3.3. Adimensionalización de la ecuación de reacción-difusión
  - 2.3.4. Solución de la ecuación diferencial para una reacción de primer orden.
- 2.4. Factor de efectividad interna y global en catalizadores porosos
- 2.5. Gradientes térmicos en el interior de pellets de catalizador
- 2.6. Reacciones complejas con difusión en poros
- 2.7. Reacción-difusión en poros de estructura compleja
  - 2.7.1. Partículas con micro y macroporos
  - 2.7.2. Poros paralelos entrecruzados
- 2.8. Estimación de regímenes limitados por la difusión y por reacción
  - 2.8.1. Criterio de Weisz-Prater para la difusión interna
  - 2.8.2. Criterio de Mears para la difusión externa
- 2.9. Ejercicios

### **3. DISEÑO DE REACTORES CATALÍTICOS DE LECHO EMPACADO**

- 3.1. Modelos como reactores pseudohomogéneos
  - 3.1.1. Modelo básico unidimensional
  - 3.1.2. Modelo unidimensional con mezclado axial
  - 3.1.3. Modelos pseudohomogéneos bidimensionales
- 3.2. Modelos heterogéneos
  - 3.2.1. Modelo unidimensional tomando en cuenta gradientes interfaciales
  - 3.2.2. Modelo unidimensional tomando en cuenta gradientes interfaciales e intrapartícula
  - 3.2.3. Modelos heterogéneos bidimensionales
- 3.3. Reactores adiabáticos de lecho empacado por etapas
  - 3.3.1. Lecho empacado por etapas con enfriamiento entre ellas
  - 3.3.2. Acercamiento a la ruta térmica óptima
  - 3.3.3. Procedimiento de diseño
  - 3.3.4. Lechos empacados por etapas con recirculación
- 3.4. Diseño de un solo reactor de lecho empacado
- 3.5. Diseño de reactores de lecho empacado en serie
- 3.6. Ejercicios

### **4. DISEÑO DE REACTORES DE LECHO FLUIDIZADO Y CON SÓLIDOS EN SUSPENSIÓN**

- 4.1. Modelos de flujo para reactores con sólidos suspendidos
  - 4.1.1. Regímenes de contacto gas-sólido
  - 4.1.2. Velocidad mínima de fluidización
  - 4.1.3. Velocidad terminal del fluido
- 4.2. Lecho fluidizado burbujeante
  - 4.2.1. Modelo de dispersión
  - 4.2.2. Modelo de tanques en serie
  - 4.2.3. Distribución de tiempos de residencia

- 4.2.4. Modelo de distribución de tiempos de contacto
- 4.2.5. Modelo de dos regiones
- 4.2.6. Modelos de flujo hidrodinámico
- 4.2.7. Modelo KL
- 4.3. Reacciones múltiples y distribución de productos en lechos fluidizados burbujeante
- 4.4. Lecho fluidizado circulante
  - 4.4.1. Operación del lecho circulante en régimen turbulento
  - 4.4.2. Lecho circulante rápido
  - 4.4.3. Lecho circulante con flujo descendente
- 4.5. Ejercicios

## **5. DISEÑO DE REACTORES CON REACCIONES GAS/LÍQUIDO SOBRE CATALIZADORES SÓLIDOS**

- 5.1. Reactores de goteo
- 5.2. Reactores con sólidos en suspensión de tres fases
- 5.3. Reactores fluidizados de tres fases
- 5.4. Modelo generalizado para la ecuación de velocidad de reacción en sistemas gas/líquido/catalizador sólido
- 5.5. Ecuaciones de diseño para un exceso del reactivo en fase líquida
  - 5.5.1. Reactivo gaseoso en tanque agitado/cualquier configuración de flujo del reactivo líquido
  - 5.5.2. Reactivo gaseoso en flujo pistón/ cualquier flujo del reactivo líquido
  - 5.5.3. Reactivo gaseoso en tanque agitado con reactivo líquido por lotes
  - 5.5.4. Reactivo gaseoso en flujo pistón con reactivo líquido por lotes
- 5.6. Ecuaciones de diseño para un exceso de reactivo en fase gaseosa
  - 5.6.1. Reactivo líquido en flujo pistón
  - 5.6.2. Reactivo líquido en tanque agitado
  - 5.6.3. Reactivo líquido por lotes
- 5.7. Elección del tipo de reactor
- 5.8. Aplicaciones
- 5.9. Ejercicios

## **6. DESACTIVACIÓN DEL CATALIZADOR**

- 6.1. Generalidades
  - 6.1.1. Desactivación por parte del producto
  - 6.1.2. Desactivación por parte del reactivo
  - 6.1.3. Desactivación por sinterizado
  - 6.1.4. Envenenamiento del catalizador
- 6.2. Reacciones que disminuyen la actividad
  - 6.2.1. Desactivación por reacciones en paralelo
  - 6.2.2. Desactivación por reacciones en serie
  - 6.2.3. Desactivación por reacciones laterales
  - 6.2.4. Modelos matemáticos de desactivación para reacciones de orden  $n$
- 6.3. Determinación experimental de la ecuación de velocidad
  - 6.3.1. Carga de sólidos para desactivación lenta. Modelos matemáticos
  - 6.3.2. Flujo de sólidos para desactivación rápida. Modelos matemáticos

- 6.4. Efecto de la resistencia a la difusión en poros sobre la cinética de catalizadores que se desactivan
- 6.5. Ecuaciones de diseño en régimen de fuerte resistencia a la difusión
- 6.6. Problemas de operación debido a la desactivación del catalizador
- 6.7. Ecuaciones de diseño para desactivación lenta
- 6.8. Desactivación en reactores de lecho empacado
- 6.9. Regeneración del catalizador
- 6.10. Envenenamiento y cinética del envenenamiento del catalizador
  - 6.10.1. Envenenamiento uniforme
  - 6.10.2. Envenenamiento de envoltente progresiva
  - 6.10.3. Efecto del envenenamiento sobre la selectividad de reacciones complejas
- 6.11. Ejercicios

## **7. DISEÑO DE REACTORES CON REACCIONES FLUIDO/FLUIDO**

- 7.1. Ecuación de velocidad
- 7.2. Modelo de velocidad para transferencia de masa interfacial y reacción
- 7.3. Cálculo de conversión en reacciones gas/líquido
- 7.4. Diseño de reactores fluido-fluido
  - 7.4.1. Modelos de contacto
  - 7.4.2. Absorción con reacción química
    - 7.4.2.1. Flujo en pistón de líquido y gas a contracorriente
    - 7.4.2.2. Flujo en pistón de líquido y gas en corrientes paralelas
    - 7.4.2.3. Gas y líquido en tanque agitado
    - 7.4.2.4. Gas en flujo pistón con líquido en tanque agitado de flujo continuo
    - 7.4.2.5. Gas en flujo pistón con líquido en tanque de borboteo de flujo continuo
    - 7.4.2.6. Flujo de gas en tanque con líquido perfectamente agitado
    - 7.4.2.7. Ejercicios

## **8. DISEÑO DE REACTORES CON REACCIONES NO CATALÍTICAS FLUIDO-PARTÍCULA SÓLIDA**

- 8.1. Modelos
  - 8.1.1. Núcleo sin reaccionar en contracción
    - 8.1.1.1. Difusión a través de la película gaseosa como etapa controlante
    - 8.1.1.2. Difusión a través de la capa de ceniza como etapa controlante
    - 8.1.1.3. Reacción química como etapa controlante
  - 8.1.2. Partículas reaccionantes de tamaño decreciente. Conversión progresiva
    - 8.1.2.1. Reacción química como etapa controlante
    - 8.1.2.2. Difusión a través de la película gaseosa como etapa controlante
    - 8.1.2.3. Régimen de Stokes para partículas pequeñas
  - 8.1.3. Limitaciones de los modelos
- 8.2. Determinación de la etapa controlante de velocidad

- 8.3. Tipos de contacto para reactores sólido-fluido
- 8.4. Reactores con partículas de un solo tamaño, con gas de composición homogénea
  - 8.4.1. Sólidos en flujo pistón
  - 8.4.2. Sólidos en mezcla completa
- 8.5. Reactores con mezcla de partículas de tamaño diferente pero constante, con gas de composición homogénea
  - 8.5.1. Sólidos en flujo pistón
  - 8.5.2. Sólidos en mezcla completa
- 8.6. Ejercicios

## 9. DISEÑO DE BIORREACTORES

- 9.1. Fermentación enzimática
  - 9.1.1. Cinética de Michaelis-Menten
  - 9.1.2. Inhibición por una sustancia extraña
  - 9.1.3. Inhibición competitiva
  - 9.1.4. Inhibición no competitiva
  - 9.1.5. Optimización de reactores enzimáticos
- 9.2. Fermentación microbiana
  - 9.2.1. Fermentadores intermitentes
  - 9.2.2. Fermentadores de flujo en pistón
  - 9.2.3. Fermentadores de tanque agitado
  - 9.2.4. Optimización de fermentadores
  - 9.2.5. Fermentación microbiana limitada por el sustrato
  - 9.2.6. Fermentación microbiana limitada por el producto
- 9.3. Mecanismo de reacciones enzimáticas a través de reactores ideales.

## BIBLIOGRAFÍA

---

### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- Froment, G. F., Bischoff, K. B., de Wilde, J. Chemical Reactor Analysis and Design, 3<sup>th</sup> edition. Wiley. USA. 2010.
- Fogler, S. Elementos De Ingeniería De Las Reacciones Química, 4<sup>a</sup> Edición. Prentice Hall. México. 2008.
- Levenspiel, O. Ingeniería de las Reacciones Químicas, 3<sup>a</sup> edición. Limusa-Wiley, México. 2004.
- Theodore, L. Chemical Reactor Analysis and Applications for the Practicing Engineer. Wiley. USA. 2012.
- Ancheyta, J. Modeling and Simulation of catalytic Reactors for Petroleum Refining. New York, Wiley. USA. 2011.
- Salmi, T. O., Mikkola, J. P., Warna, J. P. Chemical Reaction Engineering and Reactor Technology. CRC Press. New York, USA. 2010.
- Belfiore, L. A., Transport phenomena for chemical reactor design. New York. Wiley. USA. 2003.

- Levenspiel, O. El Omnilibro De Los Reactores Químicos. Reverté. Barcelona, España. 2007.
- Harriott, P. Chemical Reactor Design. M. Dekker. New York, USA. 2003
- Ranade, V. V. Computational flow modeling for chemical reactor engineering. San Diego Academic. USA. 2002.

### **BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

- Jung, J. Design and Understanding of Fluidized-bed Reactors. VDM Verlag, Berlin, Germany. 2009.
- Ranade, V. K., Chaudhari, R., Gunjal, P. R. Trickle Bed Reactors: Reactor Engineering and Applications. Elsevier. Oxford, UK. 2011
- Nauman, B. Chemical Reactor, Optimization and Scale Up. Wiley. AICHE, New Jersey. USA. 2008

### **SITIOS WEB RECOMENDADOS**

- [http://www.jiffchang.1accesshost.com/Catalysis\\_Tutorial.htm](http://www.jiffchang.1accesshost.com/Catalysis_Tutorial.htm)
- <http://jbrwww.che.wisc.edu/home/jbraw/chemreactfun/ch7/slides-masswrxn.pdf>
- <http://www.precision-combustion.com/>
- <http://pdftutorial.net/pdf/1/computational-fluid-dynamics-of-catalytic-reactors.html>
- [http://www.facebook.com/note.php?note\\_id=10150329175516580](http://www.facebook.com/note.php?note_id=10150329175516580)

### **SUGERENCIAS DIDÁCTICAS RECOMENDADAS PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA**

<b>SUGERENCIAS DIDÁCTICAS</b>	<b>UTILIZACIÓN EN EL CURSO</b>
Exposición oral	X
Exposición audiovisual	
Actividades prácticas dentro de clase	
Ejercicios fuera del aula	X
Seminarios	
Lecturas obligatorias	
Trabajo de investigación	
Prácticas de Taller	
Otras:	

## MECANISMOS DE EVALUACIÓN.

ELEMENTOS UTILIZADOS PARA EVALUAR EL PROCESO ENSEÑANZA-APRENDIZAJE	UTILIZACIÓN EN EL CURSO
Exámenes parciales	X
Examen final	X
Trabajos y tareas fuera del aula	X
Exposición de seminarios por los alumnos.	
Participación en clase	X
Asistencia	

PERFIL PROFESIOGRÁFICO REQUERIDO PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA			
LICENCIATURA	POSGRADO	ÁREA INDISPENSABLE	ÁREA DESEABLE
Ingeniería Química			Ingeniería de Reactores
Con experiencia docente			