

Índice analítico

1 INTRODUCCIÓN	1
Termodinámica	2
Cinética química	3
Clasificación de las reacciones	4
Variables que afectan a la velocidad de reacción	5
Definición de la velocidad de reacción	6
Plan de la obra	7
2 CINÉTICA DE LAS REACCIONES HOMOGÉNEAS	9
Factor dependiente de la concentración en la ecuación cinética	10
Reacciones simples y múltiples	10
Reacciones elementales y no elementales	11
Punto de vista cinético del equilibrio en reacciones elementales	12
Molecularidad y orden de reacción	13
Coeficiente cinético k	14
Representación de la velocidad de reacción	14
Modelos cinéticos para reacciones no elementales	16
Ensayo con modelos cinéticos	20
Factor dependiente de la temperatura en la ecuación cinética	24
Dependencia de la temperatura según la ecuación de Arrhenius	24
Dependencia de la temperatura según la termodinámica	24
Dependencia de la temperatura a partir de la teoría de colisión	25
Dependencia de la temperatura a partir de la teoría del estado de transición	27
Comparación de ambas teorías	28
Comparación de las teorías con la ecuación de Arrhenius	30
Energía de activación y dependencia de la temperatura	31

Predicción de la velocidad de reacción a partir de las teorías anteriores	32
Investigación del mecanismo	33
Predicción teórica de la velocidad de reacción	36
Factores que dependen de la concentración	36
Factores que dependen de la temperatura	36
Empleo en el diseño de los valores predichos	37
Problemas	38
3 INTERPRETACIÓN DE LOS DATOS OBTENIDOS EN UN REACTOR DISCONTINUO	45
Reactor discontinuo de volumen constante	46
Método integral de análisis de datos	48
Método diferencial de análisis de datos	74
Reactor discontinuo de volumen variable	79
Método diferencial de análisis	81
Método integral de análisis	81
Temperatura y velocidad de reacción	85
Investigación de una ecuación cinética	93
Problemas	96
4 INTRODUCCIÓN AL DISEÑO DE REACTORES	103
5 REACTORES IDEALES	107
Reactor ideal discontinuo	108
Tiempo espacial y velocidad espacial	110
Reactor de flujo de mezcla completa en estado estacionario	111
Reactor de flujo en pistón en estado estacionario	118
Tiempo de permanencia y tiempo espacial para sistemas fluyentes	127
Problemas	129
6 DISEÑO PARA REACCIONES SIMPLES	137
Comparación de tamaños en sistemas de un solo reactor	138
Reactor discontinuo	138

Comparación entre el reactor de mezcla completa y el de flujo en pistón para reacciones de primer y segundo orden	138
Variación de la relación de reactores para reacciones del segundo orden	141
Comparación gráfica general	141
Sistemas de reactores múltiples	147
Reactores de flujo en pistón en serie y/o en paralelo	147
Reactores de mezcla completa de igual tamaño conectados en serie	148
Reactores de flujo de mezcla completa de tamaños diferentes en serie	154
Reactores de tipos diferentes en serie	158
Reactor con recirculación	159
Reacciones autocatalíticas	165
Problemas	173
7 DISEÑO PARA REACCIONES MÚLTIPLES	179
Reacciones en paralelo	180
Reacciones en serie	191
Reacciones sucesivas de primer orden	191
Estudio cuantitativo para reactores de flujo en pistón o para reactores discontinuos	194
Reacciones sucesivas irreversibles de diferentes órdenes	200
Reacciones reversibles en serie o en paralelo	200
Reacciones en serie-paralelo	203
Extensiones y aplicaciones	214
Conclusión	219
Problemas	220
8 EFECTOS DE LA TEMPERATURA Y DE LA PRESIÓN	231
Reacciones simples	232
Cálculo de los calores de reacción a partir de la termodinámica	232
Cálculo de la constante de equilibrio a partir de la termodinámica	234
Procedimiento gráfico general de diseño	242
Progresión de temperatura óptima	242
Efectos caloríficos	243

Operaciones adiabáticas	243
Operaciones no adiabáticas	249
Consideraciones	250
Estudio del problema especial de reacciones exotérmicas en reactores de mezcla completa	252
Reacciones múltiples	262
Variación de la distribución del producto con la temperatura	262
Variación del recipiente (τ) con la temperatura para obtener la máxima producción	264
Observaciones	267
Problemas	268
9 FLUJO NO IDEAL	277
Distribución del tiempo de residencia de los fluidos en los reactores	277
Curva E. Distribución de las edades del fluido que sale de un recipiente	279
Métodos experimentales	280
Curva F	280
Curva C	282
Relaciones entre las curvas F, C y E y el «tiempo medio» en recipientes cerrados	282
Conceptos matemáticos utilizados	285
Modos de emplear la información sobre la distribución de edades	291
Cálculo directo de la conversión por la información del trazador	294
Modelos para flujo no ideal	297
Modelo de dispersión (flujo disperso en pistón)	298
Empleo del modelo de dispersión cuando el grado de dispersión es pequeño	300
Empleo del modelo de dispersión cuando el grado de dispersión es grande	303
Observaciones	306
Determinación experimental de la intensidad de la mezcla de fluidos	310
Reacción química y dispersión	313
Modelos de tanques en serie	319
Cálculo de la conversión con el modelo de tanques en serie	322
Aplicaciones	323
Modelos combinados	326

Modelos empleados para desviaciones pequeñas de flujo en pistón y colas largas	327
Tanque real con agitación	330
Determinación de flujo defectuoso en aparatos de proceso	335
Modelos para lechos fluidizados	339
Consideraciones finales	346
Problemas	347
10 MEZCLA DE FLUIDOS	359
Mezcla de un solo fluido	360
Grado de segregación	360
Mezclas de fluidos con tiempo de mezcla pequeña y grande	365
Resumen de conclusiones para un solo fluido	368
Modelos de segregación parcial	372
Mezcla de dos fluidos miscíbles	376
Distribución del producto en reacciones múltiples	378
Problemas	381
11 INTRODUCCIÓN AL DISEÑO DE REACTORES PARA SISTEMAS HETEROGÉNEOS	385
Ecuación cinética para reacciones heterogéneas	385
Modelos de contacto para sistemas de dos fases	389
Problemas	391
12 REACCIONES SÓLIDO-FLUIDO	393
Selección de un modelo	395
Modelo de núcleo sin reaccionar para partículas esféricas de tamaño constante	397
La difusión a través de la película gaseosa como etapa controlante	399
La difusión a través de la capa de cenizas como etapa controlante	401
La reacción química como etapa controlante	404
Velocidad de reacción para partículas esféricas de tamaño decreciente	406
La reacción química como etapa controlante	407
La difusión a través de la película gaseosa como etapa controlante	407

Generalización	408
Determinación de la etapa controlante de la velocidad	411
Aplicación al diseño	415
Partículas de un solo tamaño con flujo en pistón de sólidos y composición uniforme del gas	419
Mezcla de partículas de tamaños diferentes, pero constantes, flujo en pistón de sólidos, y gas de composición uniforme	419
Flujo de mezcla completa de partículas de un solo tamaño constante y gas de composición uniforme	422
Flujo en mezcla completa de partículas de diversos tamaños constantes, y gas de composición uniforme	426
Aplicación a un lecho fluidizado con arrastre de sólidos finos	429
Reacciones instantáneas	436
Problemas	441
13 REACCIONES FLUIDO-FLUIDO	449
La ecuación de velocidad	451
Regímenes cinéticos para el transporte de materia para la reacción	451
Ecuación de velocidad para reacciones instantáneas; casos A y B	453
Ecuaciones de la velocidad para reacción rápida; casos C y D	457
Velocidades intermedias; casos E y F	458
Ecuación de velocidad para reacción lenta; caso G	458
Ecuación de velocidad para reacción infinitamente lenta; caso H	459
Parámetro de conversión en la película, M	459
Indicaciones para determinar el régimen cinético a partir de los datos de solubilidad	460
Indicaciones para determinar el régimen cinético a partir de los datos experimentales	461
Cinética de reacción con sólidos en suspensión	463
Fermentaciones aerobias	464
Observaciones sobre las velocidades	465
Aplicación al diseño	466
Torres para reacciones rápidas; casos A, B, C o D	468
Torres para reacciones lentas	480

Mezcladores-sedimentadores (flujo en mezcla completa en las dos fases)	483
Modelos de contacto semicontinuo	491
Destilación reactiva y reacciones extractivas	492
Problemas	495
14 REACCIONES CATALIZADAS POR SOLIDOS	505
Ecuación de velocidad	507
La película gaseosa como etapa controlante	510
El fenómeno de la superficie como etapa controlante	510
Caso en que la resistencia a la difusión en los poros sea importante	515
Efectos caloríficos durante la reacción	525
Combinación de resistencias para partículas en condiciones isotérmicas	529
Métodos experimentales para la determinación de velocidades	531
Comparación entre los reactores experimentales	536
Determinación de las resistencias controlantes y de la ecuación de velocidad	537
Distribución del producto en las reacciones múltiples	541
Descomposición de un solo reactante por dos caminos	542
Descomposición conjunta de dos reactantes	543
Reacciones en serie	544
Extensión a los catalizadores reales	546
Aplicación al diseño	557
Reactores adiabáticos de lecho relleno por etapas	561
Reactor de lecho fluidizado	568
Problemas	577
15 DESACTIVACIÓN DE LOS CATALIZADORES	591
Mecanismo de la desactivación del catalizador	592
Ecuación cinética	595
Determinación experimental de la ecuación cinética	597
Una carga de sólidos: determinación de la velocidad cuando la desactivación es independiente de la concentración	598
Una carga de sólidos: determinación de la velocidad para la desactivación en paralelo, en serie y lateral	604

Reactores experimentales con flujo de sólidos	606
Determinación experimental del mecanismo de desactivación	606
Diseño	608
Problemas	619
INDICE DE AUTORES	625
INDICE ALFABÉTICO	629