REACTORS QUÍMICS

Una **reacció química** és una operació unitària química que té com a objectiu la reordenació dels àtoms d'unes molècules de partida (reactius) per formar altres molècules diferents (productes).

Un **reactor químic** és una unitat de procés on es porta a terme una reacció química determinada. Un reactor ha de permetre assolir els següents objectius:

1. contacte entre els reactius
2. temps necessari de contacte
3. condicions de treball adequades.
4. Eactivació

discontinu: t = temps de funcionament. ↓ continu: $t = \theta = V/q$ temps de residència

Cinètica química

$$R_i = 1/\nu_{ij} \cdot \partial n_j/\partial t$$ → velocitat extensiva de la reacció (mols/s)

$$r_i = 1/\nu_{ij} \cdot \partial c_j/\partial t$$ → velocitat intensiva de la reacció (mols/m³·s)

$$r_i = k_i \cdot \prod_{j=1}^{s} c_j^{\beta_j} - k_{-i} \cdot \prod_{j=1}^{s} c_j^{\gamma_j}$$

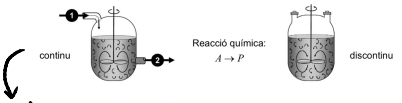
$$R_i = \int_V r_i \cdot \partial V$$

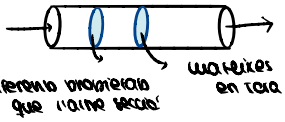
	Zeroth Order	First Order	Second Order
Differential rate law	$\text{Rate} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k$	$\text{Rate} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k[A]$	$\text{Rate} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k[A]^2$
Integrated rate law	$[A] = [A]_0 - kt$	$[A] = [A]_0 e^{-kt}$ or $\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$	$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt$
Straight-line plot to determine rate constant	Concentration, Slope = −k, Time	ln Concentration, Slope = −k, Time	1/Concentration, Slope = k, Time
Half-life	$t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k}$	$t_{1/2} = \frac{0.693}{k}$	$t_{1/2} = \frac{1}{k[A]_0}$
Units of k, rate constant	M/s	1/s	$M^{-1} \cdot s^{-1}$

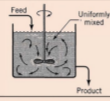
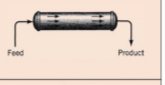
Models ideals de flux

① Model ideal de mescla perfecta: mescla total (perfecta) del fluid, que presenta propietats idèntiques en tots els punts del sistema (no té per què ser igual en el temps, però en un moment donat p.e. c_i en tot el recipient és =).

② Model ideal de flux en pistó: no hi ha cap tipus de mescla en la direcció del flux (→) però hi ha una mescla perfecta en la direcció radial (∂) de manera que les propietats del fluid són constants i uniformes a qualsevol secció perpendicular a la direcció del flux.





Model ideal de flux	Mescla perfecta	Flux en pistó
Reactor real	Reactor tanc agitat	Reactor tubular
Esquema del reactor		
Reactor ideal	Reactor tanc agitat de mescla perfecta	Reactor tubular de flux en pistó

Un **reactor de tanc agitat** intenta reproduir el model ideal de flux de mescla perfecta. S'utilitza per producions petites o mitjanes.

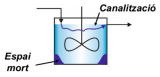
Un **reactor tubular** intenta reproduir el model ideal de flux en pistó.

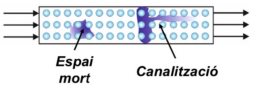
Només pot operar en **continu**, ofereix unes condicions de treball més limitades i s'empra per produccions mitjanes i ↑↑.

Característiques d'un reactor ideal
- Els reactius estan mesclats a l'entrada del reactor ($t_{mescla} = 0$, V_T = vàlid)
- No es formen agregats moleculars a l'interior del reactor (no hi ha espais morts)
- Segueix un dels anteriors models ideals de flux.

↓

causes de la no-idealitat:





Fórmules que cal recordar:

BME: $\partial/\partial t\,[n(\hat{H} - H^*)] = \sum_{m=1}^{T} (\hat{H} - \hat{H}^*)_m \cdot W_m - \sum_{i=1}^{R} R_i \Delta\hat{H}_i^* + \dot{W} + \dot{Q} - \partial(pV)/\partial t$

BMM: $\partial n/\partial t = \sum_{m=1}^{T} W_m + \sum_{j=1}^{S} \sum_{i=1}^{R} \nu_{ij} R_i$ $\quad x_A = \frac{n^0_A - n_A}{n^0_A} \cdot 100 = \frac{W^0_A - W_A}{W^0_A} \cdot 100$

$m = q \cdot \rho \quad m = V \cdot \rho \quad W_j = q \cdot c_j \quad n_j = V \cdot c_j$

Reactor de tanc agitat en discontinu:

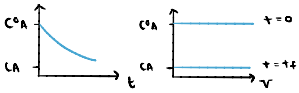
- composició idèntica a tot el reactor (en un moment donat)
- composició de la mescla evoluciona amb el temps fins a assolir la conversió donada

condicions no estacionàries

$t = 0 \rightarrow n^0_A = V \cdot C^0_A$

$t = t \rightarrow n_A(t) = V \cdot C_A(t)$

$$x_A = \frac{C^0_A - C_A(t)}{C^0_A}$$



↳ Exemple problema 1: $2M \rightarrow D$

BMM a: $\partial n/\partial t = 0 - 2R$ $\quad \partial n/\partial t = \partial(V \cdot C_M)/\partial t$ $\quad V = ct$ amb el temps, $C_M \neq ct$ amb t

$R = r \cdot V = k \cdot C_M^2 \cdot V = 2 \cdot C_M^2 V$ $\quad V \cdot \partial C_M/\partial t = -4 \cdot C_M^2 V \Leftrightarrow \int \partial C_M/C_M^2 = \int -4\,dt$

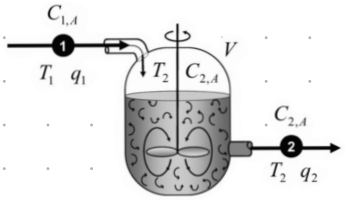
$1/C_M^2 = 4t \quad t = 1/4C_M^2$

$$V\,\partial C_A/\partial t = \sum_{i=1}^{R} (\nu_{i,A} \cdot r_i) \cdot V$$

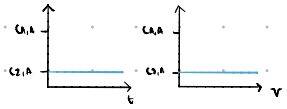
$$t = \int_{C^0_A}^{C_A} \partial C_A / \sum_{i=1}^{R} (\nu_{i,A} \cdot r_i)$$

No hi ha ni entrades ni sortides i r_i és ct en tot V → $R_i = r_i \cdot V$

Reactor de tank agitat en continu:



- Opera de manera continua però quan s'engega, s'apaga o s'alteren les variables de treball opera de forma no estacionària.
- Composició Wsortida = composició dins del tank.



↳ Exemple problema 2 (model matemàtic) $A \rightarrow 3B$

$m_A = m_2 \rightarrow \rho_A \cdot q_A = \rho_2 \cdot q_2$ $(\rho = ct)$ $\rho \cdot q_A = \rho \cdot q_2$ $q_A = q_2 = q$

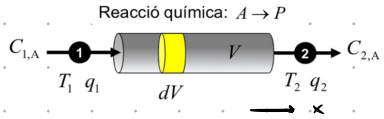
BMMA: $\partial m_A / \partial t = 0 = W_{1,A} - W_{2,A} - R$ $W_{1,A} = q \cdot C_{1,A}$ i $W_{2,A} = q \cdot C_{2,A}$

$R = r \cdot V = k \cdot V = 0.1V$ $q C_{1,A} - q C_{2,A} - 0.1V = 0$

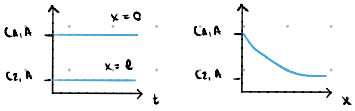
$(\rho = ct!) \longrightarrow$ $\boxed{0 = q \cdot (C_{1,A} - C_{2,A}) + \left(\sum_{i=1}^{R} \nu_{i,A} \cdot r_i\right) \cdot V}$

$$\boxed{\theta = \frac{V}{q} = \frac{C_{1,A} - C_{2,A}}{-\sum_{i=1}^{R} \nu_{i,A} \cdot r_i}}$$

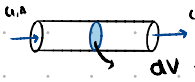
Reactor tubular de flux en pistó



- La concentració varia amb la posició al llarg del reactor però no amb el temps (un punt donat del reactor sempre tindrà la mateixa [C]) → sistema estacionari.
- Operen de manera continua i no existeix retromescla, cada partícula del corrent d'entrada va es mesclar amb l'anterior o posterior.



↳ Exemple exercici 10 (model matemàtic) $2A \rightarrow P$

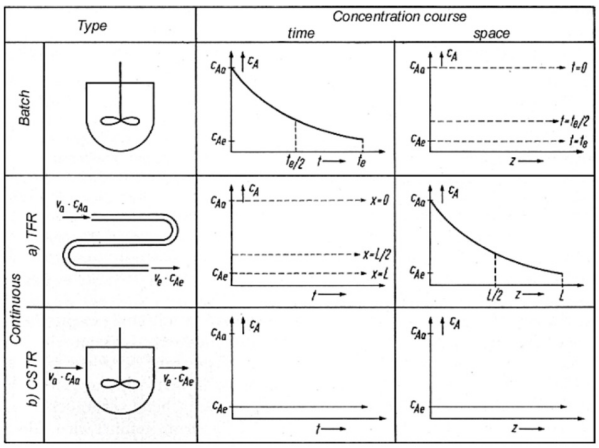


BMMA (al dV) $0 = W_A - (W_A + dW_A) + dR_A$ $dW_A = dR_A$

(↑ entrada, ↑ sortida)

$W_A = q \cdot C_A$ $dW_A = q \cdot dC_A$ $dR_A = -2\,dR = -2\,r \cdot dV = -k \cdot C_A^2 \cdot dV$

$q \cdot dC_A = -k \cdot C_A^2 \cdot dV$ $dV/q = -k \cdot dC_A / C_A^2$

$$\boxed{q \cdot dC_A = \left(\sum_{i=1}^{R} \nu_{i,A} \cdot r_i\right) \cdot dV}$$

$$\boxed{\theta = \frac{V}{q} = \int_{C_{1,A}}^{C_{2,A}} \frac{dC_A}{\sum_{i=1}^{R} \nu_{i,A} \cdot r_i}}$$