



Tomás Cordero Lanzac

Investigador postdoctoral, Universidad de Oslo

presenta

Modelado cinético de procesos catalíticos con esquemas de reacción complejo y rápida desactivación

La mayoría de los productos químicos y combustibles de la industria química son obtenidos mediante procesos catalíticos, destacando especialmente aquellos en los que intervienen compuestos orgánicos y catalizadores ácidos (craqueo catalítico y MTO/DTO, entre ellos). Nuevas rutas y catalizadores son constantemente propuestos en la literatura para mejorar la eficiencia de estos procesos en términos de selectividad y productividad. Sin embargo, uno de los mayores problemas intrínsecos de estas reacciones es la desactivación de los catalizadores, especialmente la causada por la deposición de coque. La importancia de la desactivación es tal, que determina el régimen de operación de estos procesos a escala industrial. Por este motivo, es importante el desarrollo de herramientas que permitan simular el comportamiento de nuevos catalizadores y comparar diferentes configuraciones de reactores. En primer lugar, es necesario una metodología para el modelado cinético de reacciones con rápida desactivación, que permita reproducir la evolución de la desactivación en función de la composición del medio de reacción. Este cálculo requiere una definición apropiada de la actividad y es más complejo cuando el esquema de la reacción química es complejo. Además, el cálculo simultáneo de la cinética de reacción a tiempo cero y su evolución con el tiempo, permite refinar los parámetros cinéticos para un cálculo más realista de ambas cinéticas (reacción y desactivación). En este trabajo, se pretende desarrollar el funcionamiento de esta metodología de cálculo basada en modificaciones de la ecuación general de conservación de masa, mediante su aplicación en procesos catalíticos ampliamente estudiados, como la conversión de metanol/dimetil éter a olefinas o el craqueo de parafinas.

Martes 23 de febrero, 18.00