

# T 8.3. Transporte de materia y reacción química en el interior de los poros del catalizador

Reacción gas - sólido catalítica

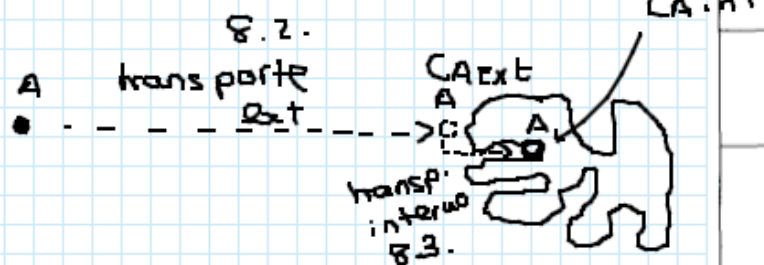


TABLA 8.3.1. Módulo de Thiele para geometrías diversas y reacciones de primer orden

$\phi_{ESFERA} = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_R \rho_p}{D_e}} = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_{RV}}{D_e}};$	$\eta_{ESFERAS} = \frac{1}{\phi_s} \left[ \frac{1}{\tanh 3\phi_s} - \frac{1}{3\phi_s} \right]$
$\phi_{CILINDRO} = \frac{R_c}{2} \sqrt{\frac{k_R \rho_p}{D_e}} = \frac{R_c}{2} \sqrt{\frac{k_{RV}}{D_e}};$	$\eta_{CILINDRO} = \frac{\tanh \phi_c}{\phi_c}$
$\phi_{LAMINA} = \frac{E}{2} \sqrt{\frac{k_R \rho_p}{D_e}} = \frac{E}{2} \sqrt{\frac{k_{RV}}{D_e}};$	$\eta_{LAMINA} = \frac{\tanh \phi_l}{\phi_l}$

$\eta \rightarrow$  factor de eficacia

$C_A$  a un radio  $R$  (cociente de la velocidad de reacción con  $C_{Aint}$  respecto a la velocidad de reacción con  $C_{Aext}$ )

$$\frac{C_A}{C_{AS}} = \frac{R_s}{R} \frac{\sinh[3\phi_s R/R_s]}{\sinh[3\phi_s]} \quad [8.70]$$

Siendo:

$C_A$  en la superficie ( $R = R_s$ )  
 $\uparrow$  radio part  
 $\rightarrow \phi_s = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_R \rho_p}{D_e}}$  ← densidad partículas [8.71]  
 $\uparrow$  cte reacción ← difusividad

Módulo Thiele

$\uparrow \eta \Rightarrow \downarrow \phi_s$

$\downarrow \eta \Rightarrow \uparrow \phi_s$

$\sinh(x) =$  seno hiperbólico

[hyp] [sin] [cos] [tan]

Ejercicio 2.-

radio suficientemente pequeño para que el transporte interno no influya y determinar  $k_{RV}$

De la experimentación realizada sobre un proceso catalítico  $A+B \xrightarrow{Cat.} C+D$ , utilizando el catalizador en partículas de tamaño de  $50 \mu$  se ha comprobado que responde a una cinética de primer orden y que la constante de velocidad a una temperatura determinada es  $0,2s^{-1}$ . El coeficiente de difusividad de A es  $5 \cdot 10^{-6} m^2 s^{-1} = D_e$

Estímese el factor  $\eta$  si se emplea para esta reacción partículas de catalizador de forma esférica y  $0,01m$  de radio.

$$\eta \rightarrow \phi_s$$

$$\phi_{ESFERA} = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_R \rho_p}{D_e}} = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_{RV}}{D_e}}; \quad \eta_{ESFERAS} = \frac{1}{\phi_s} \left[ \frac{1}{\tanh 3\phi_s} - \frac{1}{3\phi_s} \right]$$

$$\phi_{esfera} = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_{RV}}{D_e}} = \frac{0,01m}{3} \sqrt{\frac{0,2s^{-1}}{5 \cdot 10^{-6} m^2 s^{-1}}} = 0,67 \quad 0,666666$$

$$\eta_{esferas} = \frac{1}{0,67} \left[ \frac{1}{\tanh 3 \cdot 0,67} - \frac{1}{3 \cdot 0,67} \right] = 0,806$$

$$1,4999... \left[ 1,0373 - 0,49999... \right]$$

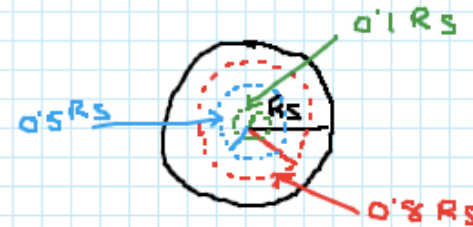
# Ejercicio 2

En un proceso gas sólido catalítico de primer orden, se ha estimado que el módulo de Thiele tiene el valor 2. Teniendo en cuenta que la geometría del catalizador responde a hipotéticas esferas, calcúlese:

El valor de  $\eta$ .

El perfil de concentraciones en la pastilla del reactivo ( $C_A/C_{AS}$ ) para distancias correspondientes a  $R = 0,8; 0,5; \text{ y } 0,1$  de  $R_s$ .

1431



$$\phi_s = 2$$

$$\eta_{\text{esferas}} = \frac{1}{\phi_s} \left[ \frac{1}{\tanh 3\phi_s} - \frac{1}{3\phi_s} \right] = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{\tanh 6} - \frac{1}{6} \right] = 0,417$$

$$\frac{C_A}{C_{AS}} = \frac{R_s}{R} \frac{\sinh[3\phi_s R/R_s]}{\sinh[3\phi_s]} \quad [8.70]$$

$$R = 0,8 R_s$$

$$\frac{C_A}{C_{AS}} = \frac{R_s}{0,8 R_s} \frac{\sinh[3 \cdot 2 \cdot 0,8 R_s / R_s]}{\sinh[3 \cdot 2]}$$

$$\frac{C_A}{C_{AS}} = 0,376 \quad \left( \begin{array}{l} \text{A un radio } 80\% \\ \text{del de la partícula} \\ \text{llega un } 37,6\% \\ \text{de } C_A \text{ en la superficie} \end{array} \right) \frac{C_A}{C_{AS}} = 0,099$$

$$R = 0,5 R_s$$

$$\frac{C_A}{C_{AS}} = \frac{R_s}{0,5 R_s} \frac{\sinh[3 \cdot 2 \cdot 0,5 R_s / R_s]}{\sinh[3 \cdot 2]}$$

$$R = 0,1 R_s$$

$$\frac{C_A}{C_{AS}} = \frac{R_s}{0,1 R_s} \frac{\sinh[3 \cdot 2 \cdot 0,1 R_s / R_s]}{\sinh[3 \cdot 2]}$$

$$\frac{C_A}{C_{AS}} = 0,032$$

1472

**Ejercicio 1.** Se desea diseñar el proceso  $A + B \rightarrow 2R$  en fase gas, de primer orden en el reactivo, catalizado por un sólido en forma de esfera, de modo que el factor de eficacia sea al menos del 70 por ciento. Indíquese el radio mínimo necesario.

Datos: Coeficiente de difusividad efectivo  $6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

$k_R$  = Constante de la reacción de primer orden  $5,7 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$

$\rho_P$  = Densidad del catalizador  $0,8 \cdot 10^3 \text{ kg m}^{-3}$

$$\eta \geq 0,7$$

$$\eta \rightarrow \phi_s \rightarrow R_s$$

Gráfica  $\eta = 0,7 \rightarrow \phi_s \approx 0,95$

$$\eta = \frac{1}{\phi_s} \left[ \frac{1}{\tanh 3\phi_s} - \frac{1}{3\phi_s} \right]$$

$$\eta = \frac{1}{0,95} \left[ \frac{1}{\tanh 3 \cdot 0,95} - \frac{1}{3 \cdot 0,95} \right] = 0,69$$

$\phi_s$  ha de ser algo menor de 0,95

$$\phi_s = 0,92 \rightarrow \eta = 0,702$$

$$\phi_s = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_R \rho_P}{D_e}}$$

$$R_s = 3 \phi_s \sqrt{\frac{D_e}{k_R \rho_P}} = 3 \cdot 0,92 \sqrt{\frac{6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}}{5,7 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1} \cdot 0,8 \cdot 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}}}$$

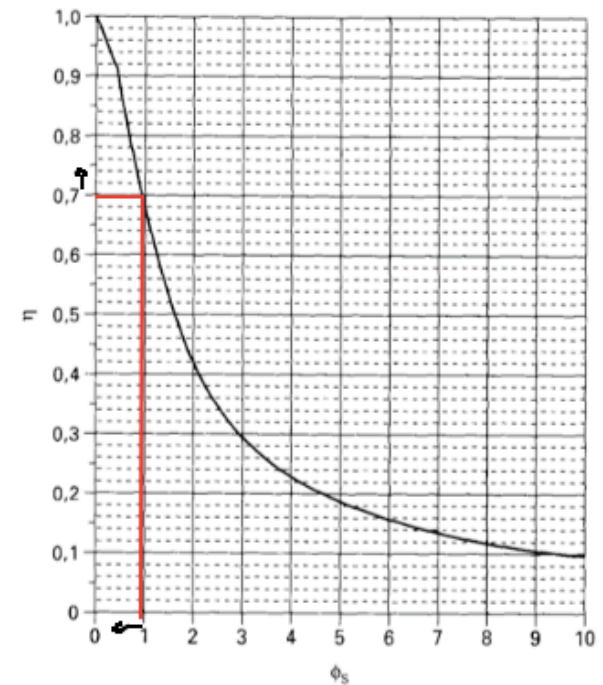


FIGURA 8.3.5. Factor de eficacia para esferas de catalizador en función del número de Thiele.

$R_s = 3,2 \text{ m}$  El radio es muy grande, esto es debido a una  $k_R$  muy pequeña.

## Ejercicio 2

En el proceso  $A \rightarrow R + S$  en fase gas catalizado por sólido en forma de esfera, de primer orden en el reactivo, se desea diseñar de modo que el factor de eficacia sea al menos del 90 por ciento. Indíquese el radio mínimo necesario.

Datos

- Coefficiente de difusividad efectivo  $2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
- Constante de la reacción de primer orden  $5,7 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$
- Densidad del catalizador  $0,8 \cdot 10^3 \text{ kg m}^{-3}$

$$\eta = 0,90 \rightarrow \phi_s = 0,45$$

$$\eta = \frac{1}{\phi_s} \left[ \frac{1}{\tanh 3\phi_s} - \frac{1}{3\phi_s} \right]$$

$$\phi_s = 0,44 \quad \eta = 0,900$$

$$\phi_s = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_R \cdot \rho_p}{D_e}}$$

$$R_s = 3\phi_s \sqrt{\frac{D_e}{k_R \rho_p}} = 3 \cdot 0,44 \sqrt{\frac{2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}}{5,7 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1} \cdot 0,8 \cdot 10^3 \text{ kg m}^{-3}}} = 8,74 \cdot 10^{-4} \text{ m} \approx 0,9 \text{ mm}$$

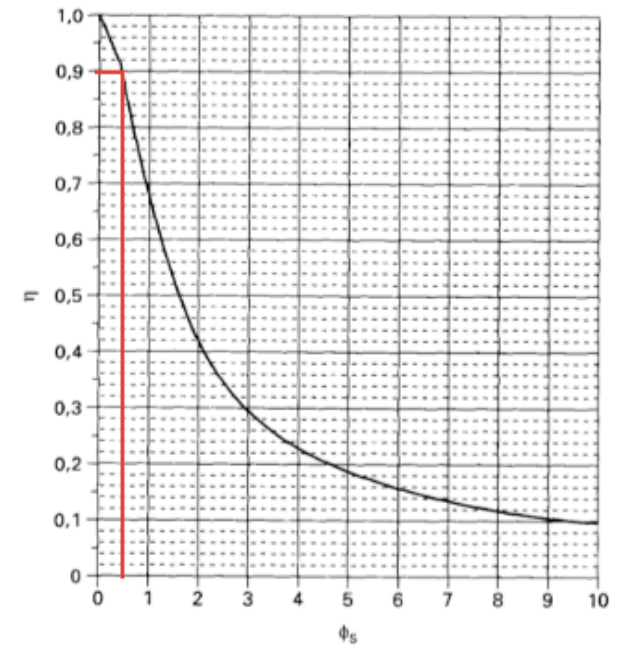


FIGURA 8.3.5. Factor de eficacia para esferas de catalizador en función del número de Thiele.

-Ejercicio 1

1271

factor de eficacia =  $\eta$   
 En un proceso catalítico  $A+B \rightleftharpoons C+D$  se alcanza en determinadas condiciones un coeficiente de efectividad de 0,80. Este mismo proceso se ha realizado aumentando 10K la temperatura de trabajo, con ello la constante de reacción se ha duplicado, y el coeficiente de difusividad ha sufrido una variación despreciable. ¿Cuál será el nuevo factor de efectividad? Justifique la respuesta. Si se duplica  $k_{rv}$ ,  $\phi_s$  se multiplica por  $\sqrt{2}$  y el factor de eficacia disminuye.  
 Dato : el sólido tiene forma esférica.

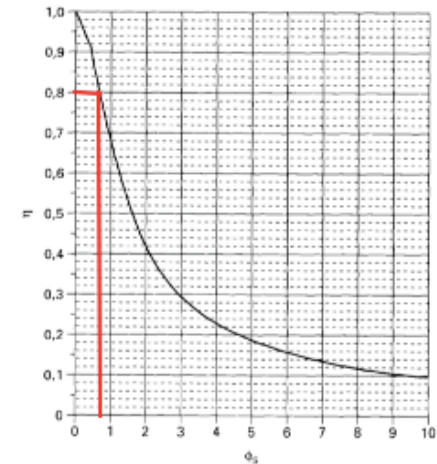


FIGURA 8.3.5. Factor de eficacia para esferas de catalizador en función del número de Thiele.

$$\eta = \frac{1}{\phi_s} \left[ \frac{1}{\tanh 3\phi_s} - \frac{1}{3\phi_s} \right]$$

$$\phi_s = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_{rv}}{D_e}}$$

$$\phi_s' = \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_{rv}'}{D_e}}$$

$$k_{rv}' = 2k_{rv}$$

$$= \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{2k_{rv}}{D_e}} = \sqrt{2} \frac{R_s}{3} \sqrt{\frac{k_{rv}}{D_e}} = \sqrt{2} \phi_s$$

Gráficamente  $\eta = 0.80 \rightarrow \phi_s = 0.75$

$\Delta T = 10K \quad \phi_s' = \sqrt{2} \cdot 0.75 = 1.06$

$$\eta' = \frac{1}{1.06} \left[ \frac{1}{\tanh 3 \cdot 1.06} - \frac{1}{3 \cdot 1.06} \right] = 0.65$$