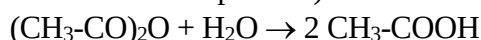


INGENIERIA DE LA REACCION QUIMICA. HOJA 3
EFFECTOS TERMICOS EN REACCIONES QUIMICAS IDEALES

- 1.- La hidrólisis en fase líquida de anhídrido acético (que puede considerarse irreversible en las condiciones del proceso):



sigue una cinética de primer orden. Un reactor discontinuo para llevar a cabo la hidrólisis se carga con 200 litros de solución de anhídrido, a 15 °C y con una concentración de $2,16 \cdot 10^{-4} \text{ mol/cm}^3$. El calor específico y la densidad de la mezcla pueden considerarse constantes e iguales a 0,9 cal/g.°C y 1,05 g/cm³, respectivamente. El calor de reacción es de 50.000 cal/mol (Exotérmica). Se dispone de los siguientes datos sobre el valor de la constante de velocidad:

T (°C)	10	15	25	40
k(min ⁻¹)	0,0567	0,0806	0,1580	0,380

a) Si el reactor es isoterma, y la operación transcurre a 15 °C, calcular el tiempo requerido para obtener una conversión del 70 %.

b) Si el reactor es adiabático, calcular el tiempo necesario para dicha conversión.

- 2.- La descomposición de un reactivo en fase líquida $A \rightarrow R + S$ se lleva a cabo en un reactor discontinuo en de 0,6 m³ en las siguientes condiciones: $y_{A0}=1$, $T_0=300 \text{ K}$. Los valores de los calores específicos de A, R y S son 185,6; 104,7 y 80,9 J/mol K, respectivamente. LA entalpía de reacción es de -7000 J/mol A y la reacción es de primer orden respecto a A con $k = 0.7 \cdot 10^{14} \exp(-10000 / T) \text{ h}^{-1}$. Determinar la variación de conversión y temperatura con el tiempo si el proceso es adiabático.

- 3.- Se desea preparar 100 Kg de una solución de un ácido al 24% en peso, a partir de su anhídrido y agua. Para ello, se dispone de un recipiente con agitador de capacidad adecuada. Se piensa introducir los reactivos simultáneamente, a la temperatura de 17 °C. Predecir la conversión y la temperatura de la mezcla en función del tiempo, si el proceso se realiza adiabáticamente. Datos:

$(-\Delta H_R)_A = 10000 \text{ cal/mol}$ de anhídrido consumido (Exotérmica)

$\rho = 1,05 \text{ g/cm}^3$, se supone constante

$C_{p,mezcla} = 1 \text{ cal/g.}^\circ\text{C}$

$r = k \cdot C_A \cdot C_B$

$\log k = 5,233 - 2323/T$ (k en l/mol.min)

$M_{\text{Acido}} = 60 \text{ g/mol}$

$M_{\text{Anhídrido}} = 102 \text{ g/mol}$

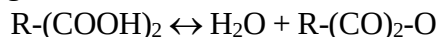
- 4.- Para la obtención de propilenglicol se ha utilizado un reactor discontinuo. El reactor se carga con 1 galón de óxido de propileno (A), 1 galón de metanol y 5 galones de agua conteniendo un 0,1% de ácido sulfúrico. La temperatura inicial es de 58°F. El reactor se comporta de forma adiabática. ¿Cuál es el tiempo necesario para alcanzar una conversión del óxido de 60%? ¿Qué temperatura se alcanza en ese punto?

Datos: $r = k C_A$ $k = 6 \cdot 10^9 \exp(-9090 / T(K)) \text{ s}^{-1}$

$(-\Delta H_R) = 36450 \text{ Btu/mol lb mol}$ óxido de propileno (a $T_0=75^\circ\text{F}$)

Realizar las simplificaciones que considere convenientes.

5.- Un diácido orgánico (AH) se deshidrata por calefacción, para dar vapor de agua y anhídrido, según la reacción:



La reacción es endotérmica, el calor de reacción es:

$(-\Delta H_R) = -18000$ cal/mol de vapor de agua producido.

La ecuación cinética es $r = k \cdot C_{AH}$, donde C_{AH} son gramos de ácido/L.

La constante de velocidad viene dada, para temperaturas entre 200 y 350 °C, por la expresión:

$$\ln k = 41 - 50.000/RT \quad (k \text{ en } \text{min}^{-1})$$

La deshidratación se lleva a cabo en un reactor agitado, cargado inicialmente con 500 Kg de ácido, a 327 °C. Este ácido tiene un peso molecular de 180. La capacidad calorífica del medio puede suponerse constante: $C_p = 0,50$ cal/g.°C.

- a) ¿Qué tiempo de operación será necesario para alcanzar una conversión de 0,40 si el reactor es adiabático?
- b) ¿Cuál es el tiempo necesario si se aportan al reactor 1000 Kcal/min?
- c) Calcúlese, en los dos casos, la temperatura en el reactor en función del tiempo.

6.- La desaparición de A sigue una cinética de primer orden y se desea llevarla a cabo en un reactor discontinuo isoterma, operando a 300 K e introduciendo 7,5 moles de A al reactor. A esta temperatura la constante cinética es 0.05 min^{-1} . Determinar Q_a y T_c en función del tiempo para mantener la isothermicidad en el reactor

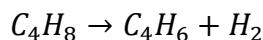
DATOS: $\Delta H_{RA} = -47500$ J/mol A $UA = 25$ W/.K

7.- La reacción $A \rightarrow C$, de primer orden con $k = 0,021 \text{ min}^{-1}$ se lleva a cabo en fase líquida en un reactor discontinuo de volumen V con un tiempo muerto t_d de 30 min entre ciclos. El reactor contiene inicialmente 5 moles de A puro. Determinar el tiempo de reacción que maximiza la producción de C y qué valor tiene esa máxima producción.

8- Una reacción de segundo orden $A \rightarrow \text{Productos}$ ($k = 0,05 \text{ L mol}^{-1} \text{ min}^{-1}$) se lleva a cabo en

un reactor discontinuo a temperatura constante y una concentración inicial de A de 2 mol/L. El tiempo muerto entre ciclos es de 20 min. Determinar el tiempo de reacción que hace máxima la producción.

9. La producción de butadieno a partir de buteno se lleva a cabo en un reactor tubular:



Se alimentan 10 moles de vapor por cada mol de buteno (en la corriente de entrada no hay butadieno ni hidrógeno). La presión de trabajo es de 2 atmosferas, y la temperatura 922K. La reacción es irreversible y de primer orden, con la siguiente relación de la constante cinética con la temperatura:

$T (K)$	922	900	877	855	832
$K (molg/hLatm)$	11	4.9	2.04	0.85	0.32

El calor de reacción y el calor específico pueden considerarse constantes e iguales a 26360 cal/g·mol y 0.5 Btu/lb·°R.

- ¿Qué volumen de reactor es necesario para alcanzar una conversión de buteno del 20% trabajando de forma isoterma a 922K y con un caudal de entrada de 22 mol/h?
- ¿Y si el reactor trabaja en condiciones adiabáticas?

10.- Se desea llevar a cabo la reacción de primer orden:

$A \leftrightarrow R$, en fase gaseosa. Se quieren tratar 400 mol/hr de A puro, obteniéndose una conversión del 50%. ¿Qué volumen de reactor es necesario si el flujo es pistón ideal, en una operación adiabática? ¿Cuál es la T máxima en el reactor? ¿Puede obtenerse una conversión mayor?

Datos $T_0 = 30^\circ C$

$(-\Delta H_R) = 12.000 \text{ cal/mol (Exotérmica)}$

$P_0 = 10 \text{ atm.} = \text{cte.}$

$M_A = 100 \text{ g/mol}$

$C_p = 0.8 \text{ cal/g.}^\circ C$

$k_1 = 10^{16} \cdot \exp(-12.000/T) (\text{h}^{-1})$;

$k_2 = 10^{19} \cdot \exp(-15.000/T) (\text{h}^{-1})$

11.- Una reacción en fase líquida $A+B \rightarrow 2C$ se lleva a cabo en un reactor tubular no isotermoditubular. El reactor está formado por tubos de 7 m de longitud y 2 cm de diámetro interno, rodeados por un fluido refrigerante a una temperatura de 350 K. Debido al exceso de B la reacción es de pseudo primer orden respecto a A, $k=4,03 \cdot 10^5 \exp(-5624/T) \text{ s}^{-1}$. El caudal másico de entrada es $0,06 \text{ kg s}^{-1}$, la densidad de la mezcla de reacción puede considerarse cte ($1,025 \text{ kg/L}$) y la temperatura de entrada al reactor es 350K.

- Calcular los perfiles de X_A y T a lo largo del reactor.
- Calcular de nuevo estos perfiles para temperaturas del refrigerante de 365, 400 y 425 K

Datos adicionales: $C_{A0}=0,5 \text{ mol/L}$ $c_p=4,2 \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$ $(-\Delta H_{RA})=210 \text{ kJ/mol A}$ $U=1,59 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$

12.- Una reacción en fase gas $A \rightarrow 2B$, que sigue una cinética de primer orden, se lleva a cabo en un reactor tubular, de forma adiabática y a 2 atm. Se alimenta A puro al reactor a 600 K. ¿Que relación V/F_{A0} es necesario utilizar para alcanzar una conversión de 0,8?

Datos: $C_{pA}=20 \text{ Btu/mol lb A K}$ $C_{pB}=15 \text{ Btu/mol lb B K}$

$(-\Delta H_R)_A=2500 \text{ Btu/mol lb}$ $k_1=\exp(6-3000/T) \text{ s}^{-1}$

- 13.- En un reactor de flujo pistón adiabático se lleva a cabo la reacción en fase gas $A+B \rightarrow R+S$. Este reactor está formado por tubos paralelos de 5 cm de diámetro interno y 2 m de longitud. La cinética de la reacción viene dada por $r=kP_A P_B$ siendo $k_{100^\circ\text{C}}=0,04$ y $k_{500^\circ\text{C}}=60$ mol/L.h.atm².

La entalpía de reacción es $(-\Delta H_R)=10000$ cal/mol. AL reactor se introducen 5 kg/h de una mezcla equimolecular de A y B a 250°C y se desea alcanzar una conversión del 35%. ¿Cuántos tubos son necesarios? Datos: $c_p=1,5$ cal/g°C (cte), $M_{\text{promedio}}=40$ g/mol

14. La reacción entre el tiosulfato de sodio y el peróxido de hidrógeno diluido es irreversible y de segundo orden respecto al tiosulfato. La constante cinética en función de la temperatura es, de acuerdo con los resultados de Kearns y Manning:

$$k = 6.85 \cdot 10^{14} e^{-\frac{18300}{RT}} \quad (\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$$

De acuerdo con la estequiometria de la reacción, dos moles de H_2O_2 reaccionan con un mol de $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$. El calor de reacción a 25°C es -131000 cal/mol.

La reacción se llevó a cabo en un reactor de mezcla completa de 2790 cm³, de forma adiabática, alimentando al reactor 14.2 cm³/s de una disolución de tiosulfato ($2.04 \cdot 10^{-4}$ mol/cm³) y peróxido ($4.08 \cdot 10^{-4}$ mol/cm³) a 25°C. ¿Cuál es la conversión y la temperatura en la corriente de salida del reactor?

- 15.- La reacción en fase líquida $A + B \rightarrow C$, se debe llevar a cabo a 120°C, en un reactor de mezcla completa de 1 m³. Se alimenta la misma concentración de A y de B, que es igual a 6'65 mol/l. Se desea alcanzar una conversión de 0'5, mediante una operación adiabática.

¿Cuál debe ser la alimentación y la temperatura de entrada?

Datos $r = K \cdot C_A \cdot C_B$, $K = 3'3 \cdot 10^9 \exp(-20.000/RT)$, l/mol.min

$(-\Delta H_R) = 20$ Kcal/mol (Exotérmica), $C_p = 0'65$ cal/cm³.°C

- 16.- La reacción elemental $A+B \rightarrow 2C$ se lleva a cabo en fase líquida en un reactor tanque continuo de 125 gal., alcanzándose una conversión de A del 90%. A partir de los siguientes datos calcular la temperatura del reactor.

Datos: Energía de activación/R = 16000 °R (°F=°Renkin – 460)

$F_{A0} = F_{B0} = 10$ mol/h (solo se alimenta A y B al reactor) $T_0 = 80^\circ\text{F}$

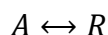
$C_{PA} = 51$ Btu/molb °F $C_{PB} = 44$ Btu/molb °F $C_{PC} = 47.5$ Btu/molb °F

$M_A = 128$ lb/molb $M_B = 94$ lb/molb $\rho_A = 63$ lb/ft³ $\rho_B = 67.2$ lb/ft³ $\rho_C = 65$ lb/ft³

Area de transmisión de calor: 10 ft² T_{vapor} que circula por la camisa: 365,9 °F $U = 150$ Btu/h.ft²°F $(-\Delta H_R) = -20000$ Btu/molb A (Endotérmica)

Si se desea una temperatura en el reactor de 175°F ¿Qué temperatura debería emplearse para el fluido calefactor? ¿Qué conversión se obtendría a la salida del reactor?

- 17.- Para el sistema reaccionante



con $r = k_1 C_A - k_2 C_R$

donde $k_1 = \exp(17,34 - 48900/RT)$ y $k_2 = \exp(42.04 - 124200/RT)$

Se desea convertir una solución acuosa concentrada de A ($C_{A0} = 4$ mol/L; $F_{A0} = 1000$ mol/min) hasta el 70 % con el menor tamaño de reactor de mezcla completa. Haga un esquema del sistema recomendado, indicando la temperatura de la corriente de entrada y salida y el tiempo espacial requerido

Datos $(-\Delta H_R) = 75300$ J/mol (Exotérmica), $C_p = 250$ cal/mol K

-
- 18.- Debe producirse hexametilentetramina (HMT) en un reactor semicontinuo, añadiendo una solución amoniacal (25 % en peso de NH_3) a una velocidad de 2 gpm, siendo su temperatura de 25°C , a una carga inicial de 238 gal (a 25°C) de una solución de formalina que contiene 42 % en peso de formaldehído. La temperatura de esta solución se aumenta a 50°C para iniciar la reacción. El calor de reacción es de $-960 \text{ Btu/lb HMT formada}$, y puede suponerse independiente de la temperatura y de la composición. A una temperatura de 100°C la reacción es muy rápida en comparación con la transferencia térmica al exterior. No son deseables temperaturas superiores a 100°C , por la vaporización y el aumento de presión. Se ha propuesto enfriar el reactor mediante serpentines internos con circulación de agua, siendo $U = 85 \text{ Btu/hr.ft}^2.\text{°F}$. La velocidad del agua en el serpentín es suficientemente alta para suponer que su temperatura no varía, permaneciendo en 25°C . Calcular la longitud necesaria de serpentín, de 1" de diámetro.

Datos:

$$\rho_{\text{solución NH}_3} = 0.91 \text{ g/cm}^3 ; \rho_{\text{solución HCHO (42\%)}} = 1.10 \text{ g/cm}^3$$

$$C_{p_{\text{sol.NH}_3}} = C_{p_{\text{mezcla}}} = 1 \text{ Btu/lb.°F}$$

Considerar la reacción irreversible.

- 19.- En un tanque continuo de 100 L, en el que se lleva a cabo la reacción:
 $A \leftrightarrow R$, cuando funciona a 300 K, se obtiene una conversión del 50 %. La cinética de la reacción es de orden 1.
- Calcular el caudal de la alimentación.
 - Para el caudal calculado en a), si la temperatura de entrada son 290 K el reactor es adiabático ¿Cuánto vale la conversión a la salida del reactor?

Datos: $(-\Delta H_R) = 8000 \text{ cal/mol}$ y $K_e = 4.54 \cdot 10^{-4} \exp(3000/T)$ $k_1 = 1000 \exp(-2424/T) \text{ (s}^{-1}\text{)}$