

**PROBLEMAS de DIFUSION INTERNA**

- 1.- Una determinada reacción de primer orden en fase gaseosa, cuando la resistencia a la difusión en los poros es despreciable, transcurre de forma que:  $r = 10^{-6} \text{ mol/s.cm}^3 \text{ cat}$  para  $C_A = 10^{-5} \text{ mol/cm}^3$ ; a 1 atm. y 400°C.  
Calcular el tamaño de las partículas de catalizador que debe emplearse para estar seguros de que el efecto de la resistencia en los poros no tiene influencia en la velocidad del proceso, si  $D_e = 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ .
- 2.- Partiendo de una concentración inicial de A de  $1'22 \cdot 10^{-5} \text{ molg/cm}^3$ , a 1 atm. y 500°C, se ha medido la velocidad de la reacción  $A \rightarrow R$ , de primer orden, encontrándose que cuando  $X_A = 0'5$ , operando a 1 atm. y 500°C,  $r = 3'86 \cdot 10^{-5} \text{ molg/s.cm}^3 \text{ cat}$ .  
Determinese el factor de efectividad, si  $D_e = 8 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$  y  $L = 0'03 \text{ cm}$ . (suponer placa plana)
- 3.- Se estudia una reacción catalizada por un sólido,  $A \rightarrow R$ , en un reactor tipo cesta. Se realizan cinco experimentos, poniendo siempre 100 g de catalizador y utilizando una temperatura de 227°C. Los resultados que se obtienen son los de la Tabla.

Exper.	CONDICIONES de OPERACION			
	q (cm <sup>3</sup> /s)	P <sub>Ao</sub> (atm)	d <sub>p</sub> (mm)	X <sub>A</sub> salida
1	500	0,50	0,2	0,33
2	500	0,75	0,5	0,33
3	500	0,50	1,0	0,31
4	250	1,00	2,0	0,26
5	250	1,00	5,0	0,08

¿En que experimentos la resistencia a la difusión interna es importante?

¿Cuanto vale el factor de efectividad en cada experimento?

Supóngase una cinética de orden uno.

La densidad del lecho catalítico es  $\rho_L = 0.65 \text{ g/cm}^3$

- 4.- La reacción  $A + B \rightarrow \text{Prod.}$  es catalizada por un sólido. Las propiedades del catalizador son:  $d_p = 2 \text{ cm}$        $\rho_p = 2 \text{ g/cm}^3$        $\epsilon_p = 0,4$        $\tau = 2,5$

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**



- 5.- Se lleva a cabo la reacción  $A \rightarrow R$ , catalizada por un sólido, en un reactor de lecho fijo de 4 cm de diámetro. Se sabe que la reacción es de orden 1. Los resultados obtenidos en cuatro experimentos, todos ellos a la misma temperatura, son los siguientes:

r (mol/g cat·s)	$1,27 \cdot 10^{-5}$	$2,10 \cdot 10^{-5}$	$1,59 \cdot 10^{-5}$	$0,65 \cdot 10^{-5}$
C (mol/cm <sup>3</sup> )	$5 \cdot 10^{-5}$	$10 \cdot 10^{-5}$	$10 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$
Q (cm <sup>3</sup> /s)	10	5	2	1

¿Influyen las etapas de difusión externa e interna?

¿Cuánto vale la constante específica de velocidad de la etapa química?

¿Cuanto valdría la k efectiva calculada a partir de los datos de la tabla?

Datos: Gas

$$\rho_g = 10^{-3} \text{ g/cm}^3$$

$$\mu_g = 10^{-5} \text{ g/cm.s}$$

$$D_g = 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$$

Catalizador

$$\rho_p = 2 \text{ g/cm}^3 \quad d_p = 1 \text{ cm}$$

$$\varepsilon_p = 0,5$$

$$\tau = 2$$

Ecuaciones de posible utilidad:

$$D_e = \varepsilon \cdot D_g / \tau$$

$$Sh = k_c \cdot d_p / D_g$$

$$Sh = 2 + 1,1 \cdot Re_p^{0,6} \cdot Sc^{1/3}$$

$$Re_p = u \cdot d_p \cdot \rho / \mu \quad Sc = \mu / \rho \cdot D_g$$

- 6.- La reacción de primer orden  $A \rightarrow R$  se ha llevado a cabo con dos tamaños de partículas, encontrando los resultados de la tabla

Rp (m)	$r_{obs}$ (mol/g s) $10^5$
0,01	3
0,001	15
0,0005	15

Estimar el modulo de thiele y el factor de efectividad de cada partícula. ¿Cuál debería ser el tamaño máximo de partícula para eliminar completamente la difusión interna?

- 7.- Se lleva a cabo una reacción en fase gas, catalizada por un sólido,  $2A \rightarrow C + D$ , que sigue una cinética elemental. Para una presión parcial de A a la entrada al reactor de 0,2 atm. y una temperatura del fluido de 273 K calcular si son importantes los gradientes de concentración externos e internos para  $X_A = 0, 0,3, 0,5, 0,7$ . Comentar la influencia de la presión del fluido.

Datos:  $k = 1,5 \cdot 10^5 \text{ cm}^3/\text{s}$ ,  $D = 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ , siendo k la constante cinética referida a volumen de

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99

Se conocen los siguientes datos:  $d_p=0,8 \text{ cm}$   $D_e=0,013 \text{ cm}^2/\text{s}$   $u_i=100 \text{ cm/s}$   $Sc=2,5$   $Re=10$ .  
 Calcular los gradientes externos e internos para una concentración en el fluido de  $0,01 \text{ mol/cm}^3$

9.- Estimar el factor de efectividad en la deshidrogenación de ciclohexano a 25 atm. y  $450^\circ\text{C}$ .  
 La reacción es irreversible. La composición es tal que  $Y_{H_2}/Y_{C_6H_{10}}$  es 4/1.

Datos:  $(-\Delta H_R) = -52500 \text{ cal/mol}$ ;  $E_a = 53.000 \text{ cal/mol}$ ;  $D_e = 16.10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ ;  
 $K_e = 5'3.10^{-4} \text{ cal/s.cm.}^\circ\text{C}$ ;  $h = 2$ .

10.- Determinar el factor de efectividad para una partícula esférica en la que tiene lugar una reacción de isomerización que sigue una cinética de primer orden.

Datos:  $d_p=0,005 \text{ m}$   $(-\Delta H_R) = -800000 \text{ J/mol}$   $D_e = 8 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$   $C_{As}=0,01 \text{ kmol/m}^3$   $T_s=400 \text{ K}$

$E_a = 120000 \text{ J/mol}$   $K_e = 0,004 \text{ J/msK}$

$k_s$  (constante cinética referida a superficie externa) =  $0,1 \text{ m/s}$  (400K)

11.- La cinética de la reacción  $A \rightarrow R$ , catalizada por un sólido, es de primer orden, obteniéndose para la constante de velocidad,  $k$ , los siguientes valores:

$k$ (1/s)	1'8	267	7490
$T$ (K)	400	500	600

¿Cuánto vale el factor de efectividad al experimentar con partículas esféricas de 1 cm de diámetro, a las tres temperaturas anteriores?

¿Con qué tamaño máximo de partícula debe haberse deducido la ecuación cinética para que sea correcta?

Datos:  $M_A = M_R = 60 \text{ g/molg}$   $\rho_p = 2 \text{ g/cm}^3$   $\epsilon_p = 0'6 \mu_m = 10^{-4} \text{ g/cm.s}$   
 $P_A = P_R = 0'5 \text{ atm.}$   $D_{AR} = 0,10 \text{ cm}^2/\text{s}$   $a = 20 \text{ \AA}$   $\tau = 5$

12.- Se lleva a cabo una reacción en fase gas catalizada por un sólido en las siguientes condiciones:  $C_A^F = 5 \cdot 10^{-5} \text{ mol cm}^{-3}$  y  $T^F = 700 \text{ K}$ . Las partículas tienen una conductividad efectiva muy elevada. Calcular la concentración, temperatura y velocidad de reacción en superficie. (la cinética de reacción es irreversible y de segundo orden)

Datos:  $k_c a_m = 2,25 \text{ s}^{-1}$   $\rho_g = 0,0009 \text{ mol/cm}^3$   $C_p = 7,5 \text{ cal/mol K}$   $h = 0,01 \text{ cal/cm}^2 \text{ s K}$   $D_e = 6,25 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$



**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE**  
**LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS**  
**CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70**

$$K_1 = 8'14 \cdot 10^{27} \exp\left[-\frac{38834}{T}\right] \quad (\text{molg /g} \cdot \text{h} \cdot \text{bar}^2)$$

$$K_2 = 3'41 \cdot 10^{15} \exp\left[-\frac{21046}{T}\right] \quad (\text{bar}^{-1})$$

Se ha obtenido, en un experimento realizado a 586 K.,  $P=1$  atm.,  $y_A = 0'31$  y  $d_p=0'26$  cm, una velocidad de reacción de  $1'20 \cdot 10^{-6}$  mol/g.s. Analizar la resistencia a la difusión interna. Calcular los perfiles de concentración en el interior de las partículas.

Datos:  $\rho_p = 2'37$  g/cm<sup>3</sup>;  $\varepsilon_p = 0'6$ ;  $a = 12'5$  Å;  $\tau = 7$ .

$(-\Delta H_R) = -13.000$  cal/mol A;  $K_e = 0'0014$  cal/cm.s.K

No existen diferencias de concentración ni temperatura entre el fluido y la superficie del catalizador.

- 14.- Se ha estudiado la reacción  $A \rightarrow R$ , de primer orden, encontrándose que la velocidad de reacción medida es  $10^5$  mol/h.m<sup>3</sup> cat, para  $C_A = 20$  mol/m<sup>3</sup> (a 1 atm. y 336°C).

Determinar la resistencia al transporte de materia en la interfase, la resistencia a la difusión en los poros, y los posibles efectos térmicos que afectan a la reacción.

Datos:  $d_p = 2'4$  mm;  $D_e = 0'5$  cm<sup>2</sup>/h;  $K_e = 0'4$  Kcal/h.m.K

$h = 40$  Kcal/h.m<sup>2</sup>.K;  $k_c = 300$  m/h;  $(-\Delta H_R) = 40$  Kcal/mol A.

- 15.- Para la reacción  $H_2 + 1/2 O_2 \rightarrow H_2O$  se han obtenido resultados experimentales con un catalizador de Pt impregnado en Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> de 1'86 cm de diámetro.

Los datos son:  $T_{\text{gas}} = 90^\circ\text{C}$ ;  $T_{\text{sup.}} = 101^\circ\text{C}$ ;  $T_{\text{centro}} = 148^\circ\text{C}$

$y_{O_2 F} = 0'05257$ ;  $P = 1$  atm.

$\rho_p = 0'0602$  g/cm<sup>3</sup>;  $(-\Delta H_R) = 115.400$  cal/mol O<sub>2</sub>

$(-R_{O_2})_{\text{obs}} = 2'49 \cdot 10^{-5}$  (molg O<sub>2</sub>/g cat.s)

$D_e = 0'166$  cm<sup>2</sup>/s;  $K_e = 6'2 \cdot 10^{-4}$  cal/cm.s.°C

$C_p = 0'20$  cal / g K

La velocidad de la etapa química, con partículas pequeñas, se encontró que sigue la ecuación:

$-R_{O_2} = 0'327 P_{O_2}^{0'8} \exp(-5230/RT)$  (molg/g.s)

¿Son importantes los gradientes internos?

- 16.- Una reacción de primer orden,  $A \rightarrow R$ , se lleva a cabo en fase gas catalizada por un sólido, alimentado A puro. Se desea saber si, en las condiciones de operación, las transferencias de materia y calor en la inter y la intrafase influyen en la velocidad del proceso.

Datos:

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99

- c) Si la difusión interna es molecular, ¿Cuánto vale el factor de efectividad?  
 d) Si es de tipo Knudsen, y el coeficiente de difusión es 100 veces menor, ¿Cuánto vale  $\eta$ ?  
 e)Cuál es la máxima diferencia de T esperable en la partícula de catalizador?

17.- Una reacción química en fase gas, de estequiometría  $A \rightarrow R$ , es catalizada por un sólido. Se desea saber si los transportes de materia y calor en la inter e intrafase influyen en la velocidad del proceso, en las siguientes condiciones de operación:

<u>Gas</u>	<u>Catalizador</u>
$D_{AR} = 2,2 \cdot 10^{-1} \text{ cm}^2/\text{s}$	$\tau = 8$
$\mu_A = 4,3 \cdot 10^{-4} \text{ g/cm}\cdot\text{s}$	$\varepsilon_p = 0,5$
$M_A = 100 \text{ g/molg}$	$d_p = 0,3 \text{ cm}$ (esferas)
$C_{pA} = 0,25 \text{ cal/}^\circ\text{C}\cdot\text{g}$	$K_e = 10^{-3} \text{ cal/cm}\cdot\text{s}\cdot^\circ\text{C}$

Ec. Cinética :  $r = k \cdot C_A$  ;  $k = 0,5 \text{ s}^{-1}$

Calor de reacción:  $(-\Delta H_R) = 30.000 \text{ cal/mol}$  (Exot)

Alimentación de A puro en las siguientes condiciones:

$P_o = 1 \text{ atm}$      $T_o = 600 \text{ K}$      $u_o = 10 \text{ cm/s}$

- a) ¿Cuánto vale  $C_A$  en la interfase?  
 b) ¿Cuánto vale aproximadamente  $T_s$ ?  
 c) Si el radio de poro es de  $300 \text{ \AA}$ , ¿cuánto vale el factor de efectividad?  
 d) Si el radio de poro es de  $30 \text{ \AA}$ , ¿cuánto vale ahora  $\eta$ ?  
 e) ¿Cual es la máxima diferencia de temperatura esperable en la partícula de catalizador?

18.- Determinar si son esperables diferencias de composición y temperatura, en la interfase y en el interior de la partícula de catalizador, en una reacción catalizada por un sólido poroso en las siguientes condiciones:

Reacción:  $r = k \cdot C_A^2$      $(-\Delta H_R) = 12000 \text{ cal/mol}$

$r_{\text{observada}} = 2 \cdot 10^{-6} \text{ mol/g}\cdot\text{s}$  a  $t = 400 \text{ K}$ ,  $P_A = 0,5 \text{ atm}$

Datos: <u>Gas</u>	<u>Catalizador</u>
$\rho_g = 10^{-3} \text{ g/cm}^3$	$\rho_p = 2 \text{ g/cm}^3$
$\mu_g = 10^{-4} \text{ g/cm}\cdot\text{s}$	$\varepsilon_p = 0,5$
$D_{AR} = 10^{-1} \text{ cm}^2/\text{s}$	$d_p = 1 \text{ cm}$ (esferas)
$C_p = 0,4 \text{ cal/}^\circ\text{C}\cdot\text{g}$	$D_e = 0,025 \text{ cm}^2/\text{s}$

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99

$$\phi = R_p/3 \cdot [(n+1)/2 \cdot (k \cdot C_A^{n-1} \cdot \rho_p)/D_e]^{0.5}$$

$$We = (n+1)/2 \cdot (r_{obs} \cdot L^2 \cdot \rho_p)/(D_e \cdot C_A^s)$$

L=e,  $R_p/2$  ó  $R_p/3$  en placas, cilindros o esferas

$$\Delta T = (-\Delta H_R) \cdot C_A \cdot D_e / Ke$$

**Los ejercicios propuestos a los alumnos son el 6, 7, 8, 10, 17 y 18**

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, blue, serif font. The '99' is significantly larger and more prominent than the 'Cartagena' part. The text is set against a light blue background with a white arrow pointing to the right, and a white shadow is cast below the text.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70