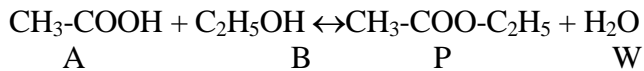


# Ingeniería de la Reacción Química.

## Problemas de Balances en Reactores Ideales

1.- La reacción irreversible  $A + B + C \rightarrow 3 R$ ; es de 1<sup>er</sup> orden respecto de cada uno de los reaccionantes. La temperatura se puede considerar constante, siendo el valor de la constante específica de velocidad:  $0,001 \text{ L}^2/\text{mol}^2 \cdot \text{min}$ . ¿Cuál será la composición en un reactor discontinuo, de 5000 L de volumen útil, al cabo de 3 horas, si se parte de 15 Kmol de A, 25 Kmol de B y 10 Kmol de C?

2.- El acetato de etilo se obtiene a partir de alcohol y ácido acético, según la reacción:



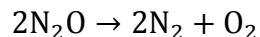
reacción en fase líquida, cuya velocidad de reacción, a 100°C, viene dada por

$$r = k(C_A C_B - \frac{C_P C_W}{K_e}) \quad \text{donde } k = 7,93 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{kmol} \cdot \text{s} \quad \text{y } K_e = 2,93$$

La mezcla inicial contiene un 25% en peso de ácido, y un 46% de alcohol en agua (no contiene éster). La densidad es constante ( $1020 \text{ Kg/m}^3$ ). La reacción se efectúa en un reactor discontinuo:

- Calcular el tiempo necesario para que la conversión del ácido sea del 35%.
- ¿Cuál es el tiempo necesario para que la conversión de este compuesto sea el 90% de la conversión de equilibrio.
- Dibujar la variación de la concentración de los compuestos A, B, P y W con el tiempo.

3. El  $\text{N}_2\text{O}$  se descompone a  $\text{N}_2$  y  $\text{O}_2$  siguiendo una cinética de segundo orden, cuya constante cinética a 895°C es  $977 \text{ cm}^3/\text{mol} \cdot \text{s}$ :



Calcule la conversión obtenida en un reactor discontinuo a 895°C tras 1s, 10s y 10 min.

4. La aspirina (ácido acetyl salicílico, ASA) se produce en reactores discontinuos a 90°C a partir de ácido salicílico (SA) y anhídrido acético (AA), generándose además ácido acético (HOAc):



Suponga que un reactor isoterma a 90°C se carga inicialmente con SA, HOAc y AA con concentraciones iniciales de 2.8, 2.8 y 4.2 mol/L respectivamente, siendo la cinética de la reacción a 90°C:

$$r = 0.30 C_{\text{SA}} C_{\text{AA}} \quad \left( \frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{h}} \right)$$

- ¿Cuál será la concentración de SA, AA, HOAc y ASA después de dos horas de reacción?
- ¿Cuánto tiempo es necesario para que la concentración de SA sea de 0.14 mol/L?
- ¿Cuántas libras de ASA pueden producirse en un reactor de 10000 L en un año si la conversión de SA es del 95%? Considere que el tiempo requerido para operaciones de carga-descarga del reactor, limpieza y acondicionamiento, etc es de 5 h por carga.

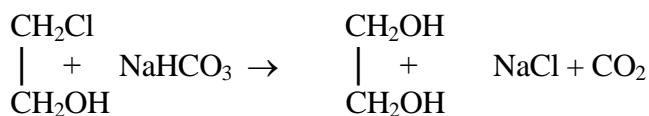
5. La enzima E cataliza la fermentación del sustrato A obteniéndose el producto R.  

$$A \rightarrow R$$

Halle el tamaño del reactor de mezcla completa requerido para alcanzar el 95 % de conversión de una corriente de alimentación (25 L/min) de reactivo (2 mol/L) y enzima. La cinética de la fermentación a esta concentración de enzima viene dada por:

$$r = 0,1 C_A / (1 + 0,5 C_A) \quad (\text{mol}/(\text{L}\cdot\text{min}))$$

- 6.- Dada la reacción irreversible, de orden 2



Se parte de una disolución acuosa de bicarbonato al 20% y otra de etilenclorhidrina al 25%, ambos en peso.

Calcular el volumen del reactor de mezcla completa necesario para producir 15'4 Kg/hr de etilenglicol con una conversión del 95%, y una alimentación equimolecular obtenida al mezclar las corrientes citadas.

Datos:  $T = 82 \text{ }^\circ\text{C}$  y  $\rho = 1'02 \text{ g}/\text{cm}^3$ , ambas constante. A  $82 \text{ }^\circ\text{C}$   $k = 5'2 \text{ L}/\text{mol}\cdot\text{h}$ .

- 7- Una reacción en fase gas  $2 A \rightarrow R$  se lleva a cabo en un reactor tanque continuo de 10 L a  $150 \text{ }^\circ\text{C}$  y 2 atm y alimentando un caudal molar de A puro de 3 mol/s.

Se sabe que la ecuación cinética tiene la forma:  $-R_A = \frac{k_1 C_A}{1 + k_2 C_A}$  con  $k_1 = 12,23 \text{ s}^{-1}$  y  $k_2 = 7,02 \text{ L}/\text{mol}$ . Calcular la conversión a la salida del reactor

8. La reacción elemental en fase líquida  $A + 2B \leftrightarrow R$  tiene lugar en un tanque continuo de mezcla completa. Al reactor entran dos corrientes de igual caudal volumétrico, 3L/min, una conteniendo 2,8 mol A/L y otra conteniendo 1,6 mol/L de B. Se desea una conversión del 75% del reactivo limitante.

La cinética de la reacción es  $r = 12,5 C_A C_B^2 - 1,5 C_R \text{ mol}/\text{L}\cdot\text{min}$

Calcular el volumen necesario del reactor

9. La reacción  $2A \leftrightarrow B + C$  se lleva a cabo en un tanque agitado continuo de 10 L. Se alimenta una concentración de A a la entrada de 0,559 mol/L. La cinética de la

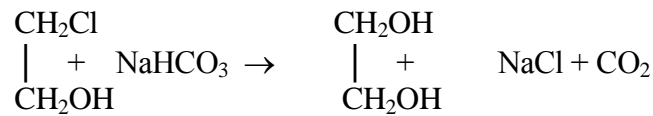
reacción es  $r = 10,35 \left( C_A^2 - \frac{C_B C_C}{K_e} \right) \text{ mol}/\text{L}\cdot\text{h}$  y la conversión de equilibrio de A a

la temperatura de operación es 0,9.

a) Simular la curva de conversión con el tiempo de residencia en el reactor.

b) ¿ Qué caudal de entrada sería necesario para conseguir una conversión del 50%?

- 10.- Dada la reacción irreversible, de orden 2

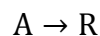


Se parte de una disolución acuosa de bicarbonato al 20% y otra de etilenglicol al 25%, ambos en peso.

Calcular el volumen del reactor tubular necesario para producir 15'4 Kg/hr de etilenglicol con una conversión del 95%, y una alimentación equimolecular obtenida al mezclar las corrientes citadas.

Datos:  $T = 82 \text{ }^\circ\text{C}$  y  $\rho = 1'02 \text{ g/cm}^3$ , ambas constante. A  $82 \text{ }^\circ\text{C}$   $k = 5'2 \text{ L/mol.h}$ .

11. Una enzima específica actúa como catalizador en la fermentación de un compuesto A.

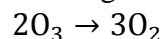


Halle el volumen del reactor de flujo en pistón requerido para alcanzar el 95 % de conversión del reactivo A ( $C_{A0} = 2 \text{ mol/L}$ ). La cinética de la fermentación con esta concentración de enzima viene dada por:

$$r = 0,1 CA / (1 + 0,5 CA) \quad (\text{mol/L}\cdot\text{min})$$

Compare los resultados obtenidos con los del ejercicio 13.

12. Una mezcla de 20 % de ozono y 80 % de aire a 1,5 atm y  $95 \text{ }^\circ\text{C}$  pasa con un caudal de 1 L/s a través de un reactor de flujo en pistón. Bajo estas condiciones el ozono se descompone mediante la reacción homogénea



$$(-R_A) = kC_{\text{O}_3}^2 \quad k = 0,05 \text{ L/mol s}$$

¿Qué tamaño de reactor se requiere para alcanzar 50 % de conversión?

Octave\_Levenspiel 3ª edición. Pag 115. Flujo pistón, fase gas

- 13.- La descomposición de fosfina ( $\text{PH}_3$ ) a fosforo vapor ( $\text{P}_4$ ) e hidrógeno se lleva a cabo en un reactor tubular e isoterma a  $925\text{K}$  y a presión constante, con un flujo molar de entrada de  $\text{PH}_3$  también constante. Calcule el tiempo espacial requerido para alcanzar una conversión del 50% de la fosfina. La cinética de la reacción, a  $925\text{K}$  es:

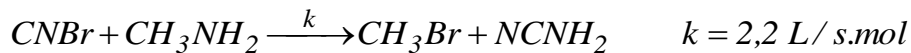
$$r = 3.6 \cdot 10^{-3} C_{\text{PH}_3} \left( \frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{s}} \right)$$

- 14.- La esterificación de ácido acético con alcohol etílico se lleva a cabo en un tanque semicontinuo, a una temperatura constante de 100 °C. El alcohol se añade al reactor, inicialmente, como una carga de 400 lb de alcohol etílico puro. Luego se agrega una solución acuosa de ácido acético a una velocidad de 3'92 lb/min durante 120 min. La solución contiene 42'6 % en peso de ácido. Supóngase la  $\rho$  del agua. La reacción es reversible, la cinética de 2° orden, con valores de las constantes, a 100 ° C:

$$k = 4'76 \cdot 10^{-4} \text{ l/mol.min} \qquad k' = 1'63 \cdot 10^{-4} \text{ l/mol.min}$$

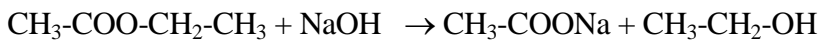
Calcular la conversión de ácido a éster en función del tiempo, desde 0 a 120 min.

- 15.- La producción de bromuro de metilo es una reacción irreversible elemental que se lleva a cabo en fase líquida en un reactor semicontinuo isoterma.



Inicialmente, el reactor se carga con 5 L de una disolución de bromocianuro ( $C_{A0}=0,05 \text{ mol/L}$ ) y se va adicionando la metil amina (B) a una concentración de 0,025 mol/L y con un caudal de 0,05 L/s. Determinar las concentraciones de A, B, bromuro de metilo (C) y la velocidad en función del tiempo.

- 16.- La saponificación de Acetato de Etilo:



se lleva a cabo en un reactor semicontinuo, isoterma, a 17°C. Inicialmente, en el reactor hay 200 cm<sup>3</sup> de una disolución de NaOH 0.12 M, y en un cierto instante (tiempo cero), se introduce de forma continua un caudal de 30 cm<sup>3</sup>/min de una disolución 0,1 M de Acetato de Etilo, sin que exista salida del sistema.

- ¿Qué tiempo es necesario para que la conversión de NaOH sea del 90%?
- ¿Cual será la evolución de todas las concentraciones con el tiempo ?
- ¿Cómo cambian las conversiones de acetato de etilo y de sosa con el tiempo?

La ecuación cinética de la saponificación es:

$$r = 1'782 \cdot 10^9 \cdot \exp(-5861/T) \cdot C_A \cdot C_B \quad \text{mol/l.min}$$

- 17.- La destrucción de un componente indeseable, en los residuos acuosos de un proceso, se logra por medio de la hidrólisis irreversible en tres tanques en serie, de 30 m<sup>3</sup> cada uno. La reacción puede considerarse como de primer orden, lográndose en el sistema una destrucción del 87'5 % de dicho componente, para una alimentación de 300 m<sup>3</sup>/hr. Un cambio de legislación, aplicable a dicho componente, requiere aumentar su destrucción al 98'4 % .

- ¿Cuántos tanques de 30 m<sup>3</sup> es necesario colocar en serie, además de los existentes, para lograrlo?
- Sin aumentar el número de tanques, ¿Cuánto habría que disminuir el caudal?
- ¿Cuál es la solución más conveniente? Justificar la respuesta

- 18.- La reacción  $2A \leftrightarrow C + D$ , se efectúa en una batería de reactores con agitación, con un caudal de 3000 l/hr. La concentración inicial de A es 25 mol/l, siendo nulas las de C y D. La constante específica de la reacción directa es 0,62 l/mol.h y la constante de equilibrio 16,0. Se desea obtener una conversión del 80 % de la de equilibrio.
- ¿Qué tamaño de tanque se necesita si sólo se emplea uno?
  - Si se dispone de tanques cuya capacidad es la décima parte de la calculada en el apartado a) ¿Cuántos de estos tanques han de colocarse en serie?
- 19.- Para llevar a cabo la reacción  $A \rightarrow \text{Productos}$ , en fase líquida y de segundo orden, se utiliza una batería de tres tanques en serie. La concentración de A a la entrada es 1.5 mol/L siendo el caudal volumétrico 2.5 L/min. La constante cinética es  $k=0.04$  L/mol.min. Determinar la conversión de A a la salida si  $V_1=10$  L,  $V_2=20$  L y  $V_3=50$  L.
20. Una reacción irreversible:  $A + B \rightarrow \text{Prod.}$ , se lleva a cabo en fase líquida, sin cambio de densidad. Su cinética es de 2º orden, con  $k=10$  L/mol.min. Se quiere realizar a partir de concentraciones iguales de A y de B ( $C_{A0}=1$  mol/L), empleando uno o dos tanques agitados continuos, obteniéndose, en todo caso, una conversión del 99%.  
¿Cuáles serán los tiempos de residencia totales ( $V/Q$ ) para obtener la misma conversión, empleando uno o dos tanques (cuando se usan dos, son de igual volumen).
21. Una disolución de anhídrido acético se hidroliza de forma continua a 25°C. A esta temperatura, la ecuación cinética es:  

$$r=0.158 \cdot C^2 \quad (\text{mol/cm}^3 \cdot \text{min})$$
 Deben tratarse 500 cm<sup>3</sup>/min de una disolución de anhídrido acético de concentración  $1.5 \cdot 10^{-4}$  mol/cm<sup>3</sup>, para lo cual hay dos reactores de mezcla completa de 2.5L y uno de 5L.
- ¿Es la conversión mayor en el tanque de 5L o en los dos tanques de 2.5L colocados en serie? En este último caso los 500 cm<sup>3</sup>/min se alimentarían al primer reactor y la salida de éste se enviaría a la entrada del segundo.
  - ¿Se alcanzaría una mayor conversión trabajando con los dos reactores de 2.5L en paralelo? En este caso el alimento se dividiría en dos partes iguales de 250 cm<sup>3</sup>/min y cada una se alimentaría a un reactor. La salida de ambos se uniría en una sola corriente.
  - ¿y si se empleara un reactor de flujo pistón de 5L?
  - ¿Aumentaría la conversión si tras un tanque de 2.5L se añadiese en serie un reactor de flujo pistón de 2.5L?

- 22.- La reacción en fase líquida  $A+2B\rightarrow C$  se lleva a cabo en dos reactores continuos de tanque agitado. La reacción es de primer orden respecto de A y B. Determinar el volumen que se requiere para alcanzar una conversión del 75% si
- los dos reactores están en serie
  - los dos reactores están en paralelo, cada uno de ellos con igual caudal volumétrico.

datos:  $k=0.06 \text{ L/mol}\cdot\text{s}$   $Q=25 \text{ L/min}$   $C_{A0}=0.1 \text{ mol/L}$   $C_{B0}=0.2 \text{ mol/L}$

- 23- La oxidación de un compuesto, A, en fase gas se lleva a cabo en un reactor tubular a  $550 \text{ }^\circ\text{C}$  y  $10 \text{ atm}$ . La concentración de A en la corriente a tratar es del 10% y la reacción de oxidación fuertemente exotérmica. Para evitar un aumento brusco de temperatura se diluye la concentración de A a la entrada al reactor recirculando parte de la corriente de salida. ¿Qué relación de recirculación debe emplearse para que la concentración de A que se alimenta al reactor sea del 0,5%, si se desea una conversión del 98% del reactivo fresco? Los valores de presión y de temperatura permanecen constantes en el reactor.
- 24- Una reacción autocatalítica  $A \xrightarrow{B} B + \dots$  se lleva a cabo en fase líquida en un reactor tubular de flujo pistón. Se desea alcanzar una conversión de A del 90% para un caudal fresco de entrada de  $0.5 \text{ L/s}$  siendo  $C_{A0}=1.5 \text{ mol/L}$   $C_{B0}=0$ . La cinética es  $r=kC_A C_B$  siendo  $k=0.002 \text{ L/mol}\cdot\text{s}$ . Que volumen de reactor es necesario si se utiliza un reactor tubular con recirculación  $R=0.2$ ,  $R=0.5$ ,  $R=1$ . Comentar la diferencias encontradas.
25. Considere la reacción en fase líquida que se lleva a cabo en un reactor tubular de  $30 \text{ L}$ :



Que tiene una velocidad de reacción de:

$$r = 0.2C_A^2 \quad \left(\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{min}}\right)$$

- ¿Cuál será la concentración de A a la salida del reactor para un caudal de entrada de  $10 \text{ L/min}$  y una concentración de entrada de A de  $1.2 \text{ mol/L}$ ?
- ¿Cuál será ahora la concentración de A a la salida si se decide recircular un caudal de  $5 \text{ L/min}$ ?