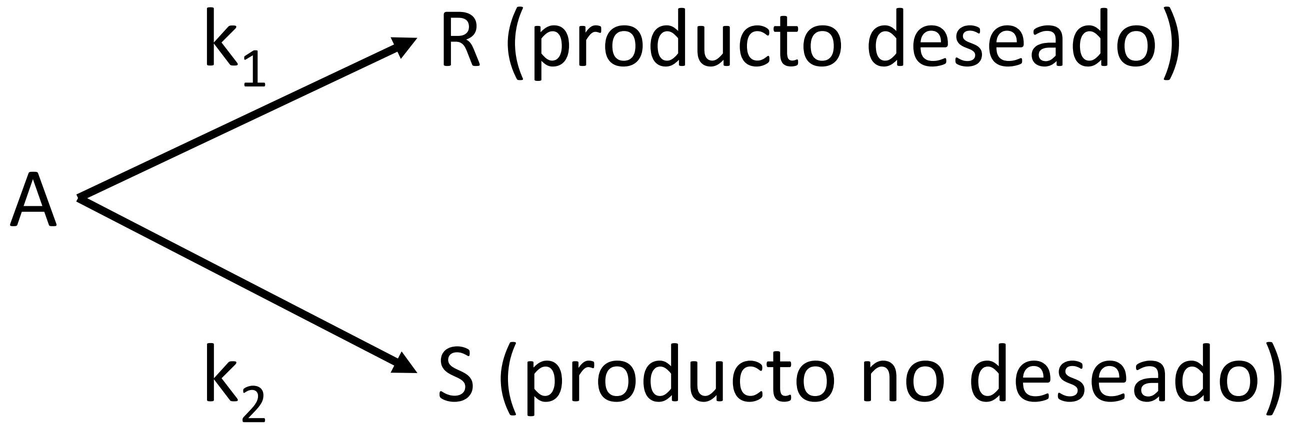
Criterio de selección del Tipo de Reactor para Reacciones en paralelo



$$\frac{v_S}{v_R} = \frac{k_2 C_A^{n_2}}{k_1 C_A^{n_1}} = \frac{k_2}{k_1} C_A^{(n_2 - n_1)}$$

$$\frac{v_S}{v_R} = \frac{k_2 C_A^{n_2}}{k_1 C_A^{n_1}} = \frac{k_2}{k_1} C_A^{(n_2 - n_1)}$$

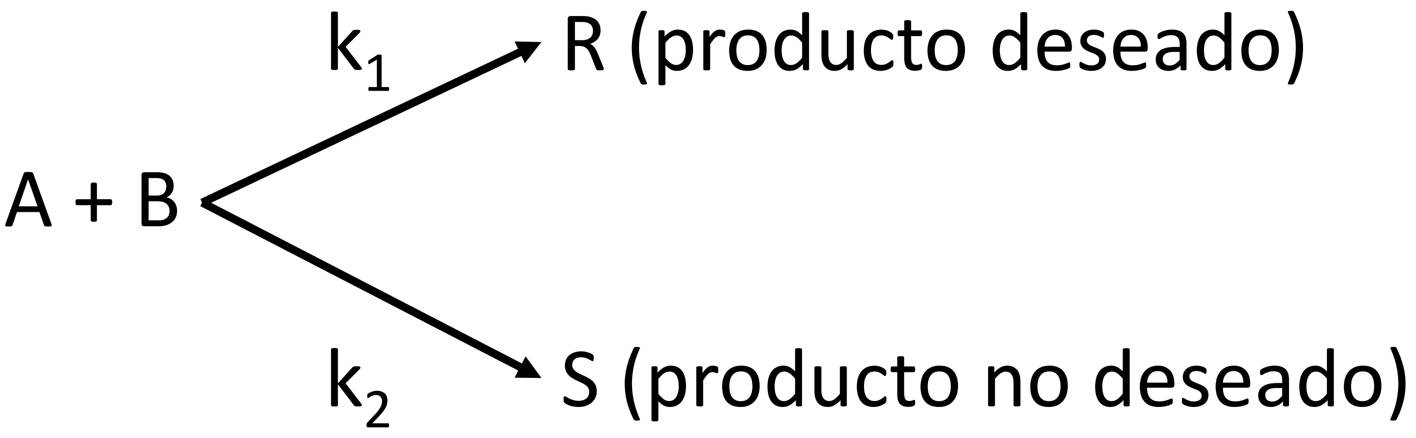
Si $n_2 - n_1 > 0$ entonces se debe trabajar a baja C_A, esto implica alta conversión de A

→ Reactor Mezcla Completa

Si $n_2 - n_1 < 0$ entonces se debe trabajar a alta C_A, esto implica baja conversión de A

→ Reactor Flujo en Pistón o Reactor Discontinuo

Reacciones en paralelo



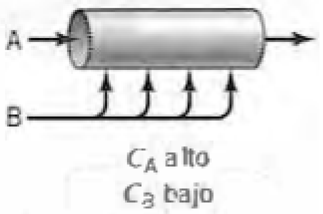
$$\frac{v_S}{v_R} = \frac{k_2 C_A^{n_2} C_B^{m_2}}{k_1 C_A^{n_1} C_B^{m1}} = \frac{k_2}{k_1} C_A^{(n_2-n_1)} C_B^{(m_2-m_1)}$$

$$\frac{v_S}{v_R} = \frac{k_2 C_A^{n_2} C_B^{m_2}}{k_1 C_A^{n_1} C_B^{m1}} = \frac{k_2}{k_1} C_A^{(n_2-n_1)} C_B^{(m_2-m_1)}$$

Si $n_2 - n_1 > 0$ y $m_2 - m_1 > 0$ entonces debo trabajar a baja C_A y C_B → Reactor Mezcla Completa

Si $n_2 - n_1 < 0$ y $m_2 - m_1 < 0$ entonces debo trabajar a alta C_A y C_B → Reactor Flujo en Pistón o Reactor Discontinuo

Si $n_2 - n_1 < 0$ y $m_2 - m_1 > 0$ entonces debo trabajar a alta C_A y baja C_B → A en régimen FP y B en régimen MC



Estudio cuantitativo de la distribución del producto

φ: rendimiento fraccional instantáneo

$$\varphi = \left(\frac{moles\ de\ R\ formados}{moles\ de\ A\ que\ han\ reaccionado}\right) = \frac{dC_R}{-dC_A}$$

Φ: rendimiento fraccional global

$$\emptyset = \left(\frac{moles\ de\ R\ totales}{moles\ de\ A\ que\ han\ reaccionado}\right) = \frac{C_{Rf}}{C_{A0} - C_{Af}}$$

$\Phi_{MC} = \varphi$ calculada para C_{Af}

$$\phi_{FP} = \frac{-1}{C_{A0} - C_{Af}} \int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \varphi \, dC_A = \frac{1}{\Delta C_A} \int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \varphi \, dC_A$$

C_{Rf} (FP) C_{Rf} (MC) C_{Rf} (3 reactores de MC en serie)

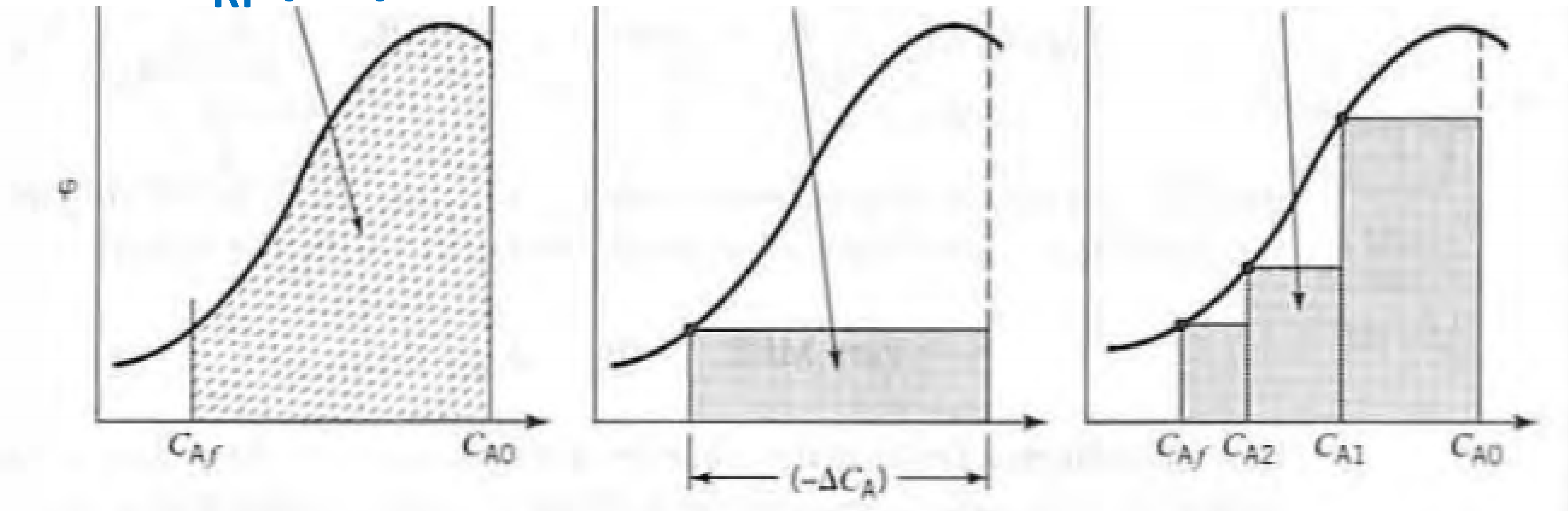


Figura 7.3. Las áreas sombreadas y de líneas discontinuas proporcionan la cantidad total de R formado

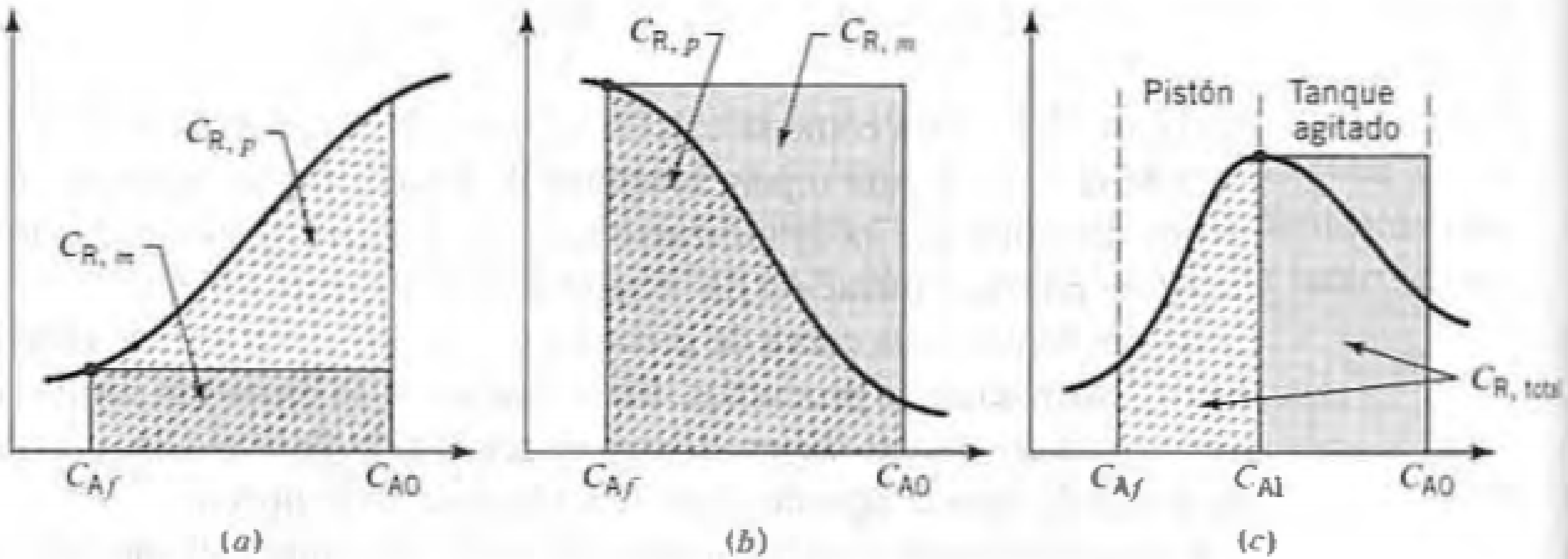


Figura 7.4. El modelo de contacto con el área mayor produce la máxima cantidad de R: *a*) es mejor el flujo pistón, *b*) es mejor el flujo del reactor de tanque agitado, *c*) es mejor el flujo de tanque agitado hasta C_{A1} y después el flujo pistón

Ejercicio de aplicación:

Para las reacciones competitivas en fase líquida

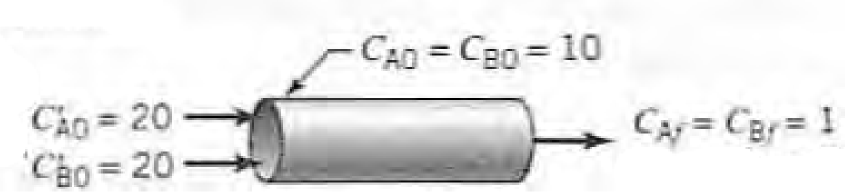
$$A + B \xrightarrow{k_1} R \quad \text{(deseado)} \qquad \frac{dC_R}{dt} = 1{,}0 C_A C_B^{0{,}3}$$

$$A + B \xrightarrow{k_2} S \quad \text{(no deseado)} \qquad \frac{dC_S}{dt} = 1{,}0 C_A^{0{,}5} C_B^{1{,}8}$$

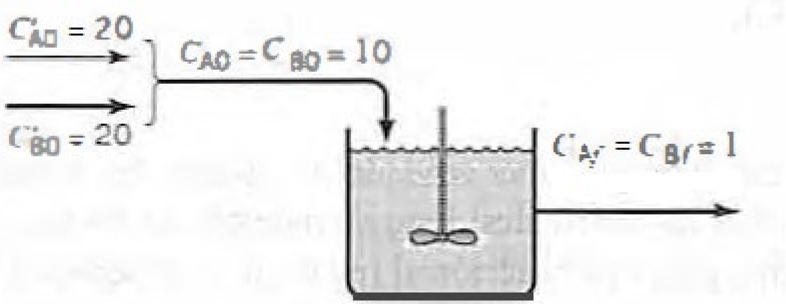
$$\frac{v_S}{v_R} = \frac{k_2 C_A^{0.5} C_B^{1.8}}{k_1 C_A C_B^{0.3}} = \frac{k_2}{k_1} C_A^{-0.5} C_B^{1.5} \Rightarrow C_A \uparrow\uparrow (\boldsymbol{FP}) \quad C_B \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow (\boldsymbol{MC})$$

Calcule la fracción de impureza en la corriente de producto para la conversión del 90 % de A y B puros (considere que las concentraciones de cada uno son 20 M)

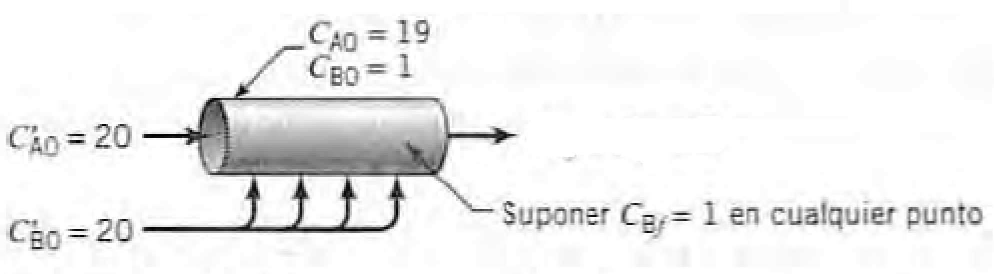
a) Para flujo pistón.



b) Para flujo en mezcla completa.

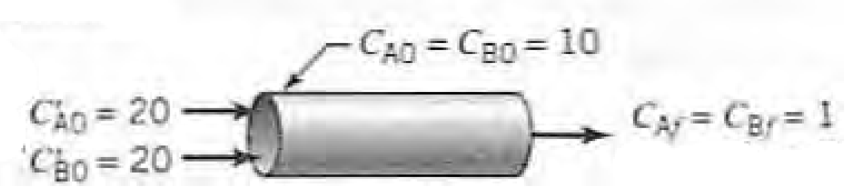


c) Para A en régimen flujo pistón y B en régimen mezcla completa (considere concentraciones B igual a 1 M).



$$\frac{dC_R}{dt} = 1{,}0 C_A C_B^{0{,}3}$$

$$\frac{dC_S}{dt} = 1{,}0 C_A^{0{,}5} C_B^{1{,}8}$$

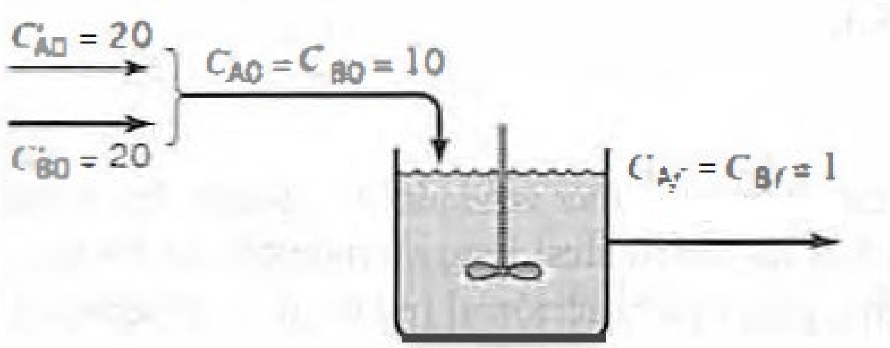


$$\varphi = \frac{dC_R}{dC_R + dC_S} = \frac{C_A C_B^{0.3}}{C_A C_B^{0.3} + C_A^{0.5} C_B^{1.8}} = \frac{1}{1 + C_A^{-0.5} C_B^{1.5}} \qquad C_A = C_B$$

$$\emptyset_{FP} = \frac{-1}{C_{A0} - C_{Af}} \int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \varphi \, dC_A = \frac{-1}{10-1} \int_{10}^{1} \frac{dC_A}{1 + C_A}$$

$$\frac{-1}{9} \ln(1 + C_A) \Big|_{10}^{1} = \frac{1}{9} \ln\left(\frac{11}{2}\right) = \mathbf{0.19 \Rightarrow 81\%\ \mathit{impurezas}}$$

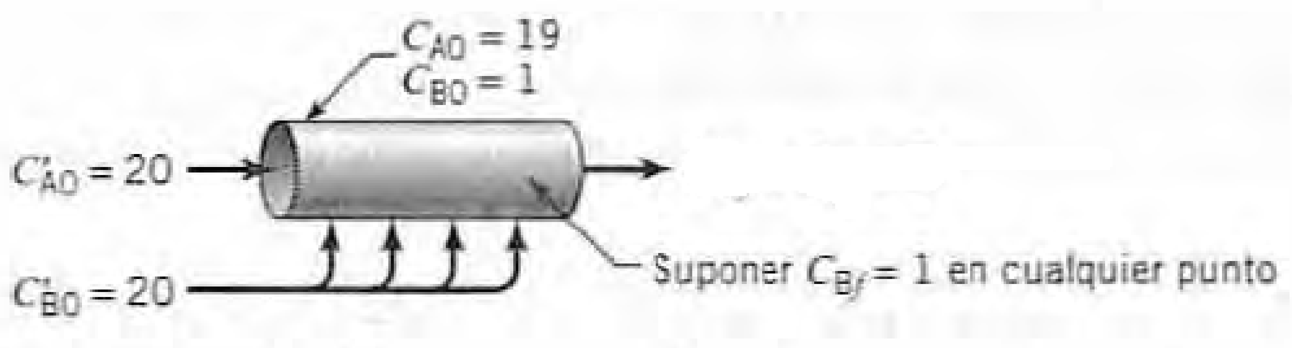
$$\frac{dC_R}{dt} = 1{,}0C_A C_B^{0{,}3}$$
$$\frac{dC_S}{dt} = 1{,}0C_A^{0{,}5} C_B^{1{,}8}$$



$$\varphi = \frac{dC_R}{dC_R + dC_S} = \frac{C_A C_B^{0.3}}{C_A C_B^{0.3} + C_A^{0.5} C_B^{1.8}} = \frac{1}{1 + C_A^{-0.5} C_B^{1.5}} \qquad C_{Af} = C_{Bf} = 1$$

$$\emptyset_{MC} = \varphi_{CAf} = \frac{1}{1+1} = \frac{1}{2} \qquad \Rightarrow \mathbf{50\%}\ \boldsymbol{impurezas}$$

$$\frac{dC_R}{dt} = 1{,}0C_A C_B^{0{,}3}$$
$$\frac{dC_S}{dt} = 1{,}0C_A^{0{,}5} C_B^{1{,}8}$$



$$\varphi = \frac{dC_R}{dC_R + dC_S} = \frac{C_A C_B^{0.3}}{C_A C_B^{0.3} + C_A^{0.5} C_B^{1.8}} = \frac{1}{1 + C_A^{-0.5} C_B^{1.5}}$$

$$\emptyset_{FP} = \frac{-1}{C_{A0} - C_{Af}} \int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \varphi dC_A = \frac{-1}{19 - 1} \int_{19}^{1} \frac{dC_A}{1 + C_A^{-0.5} 1^{1.5}}$$

$$\frac{1}{18} \int_{1}^{19} \frac{dC_A}{1 + C_A^{-0.5}} = \frac{1}{18} [(19 - 1) - 2\left(\sqrt{19} - 1\right) + 2 \ln \frac{1 + \sqrt{19}}{2}] = \mathbf{0.741}$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{26\%\ impurezas}$$

Criterio de selección de las condiciones operativas para Reacciones en serie

$$A \xrightarrow[k_1]{} R \xrightarrow[k_2]{} S$$

En este caso conviene trabajar a baja conversión para lograr el máximo rendimiento en R.

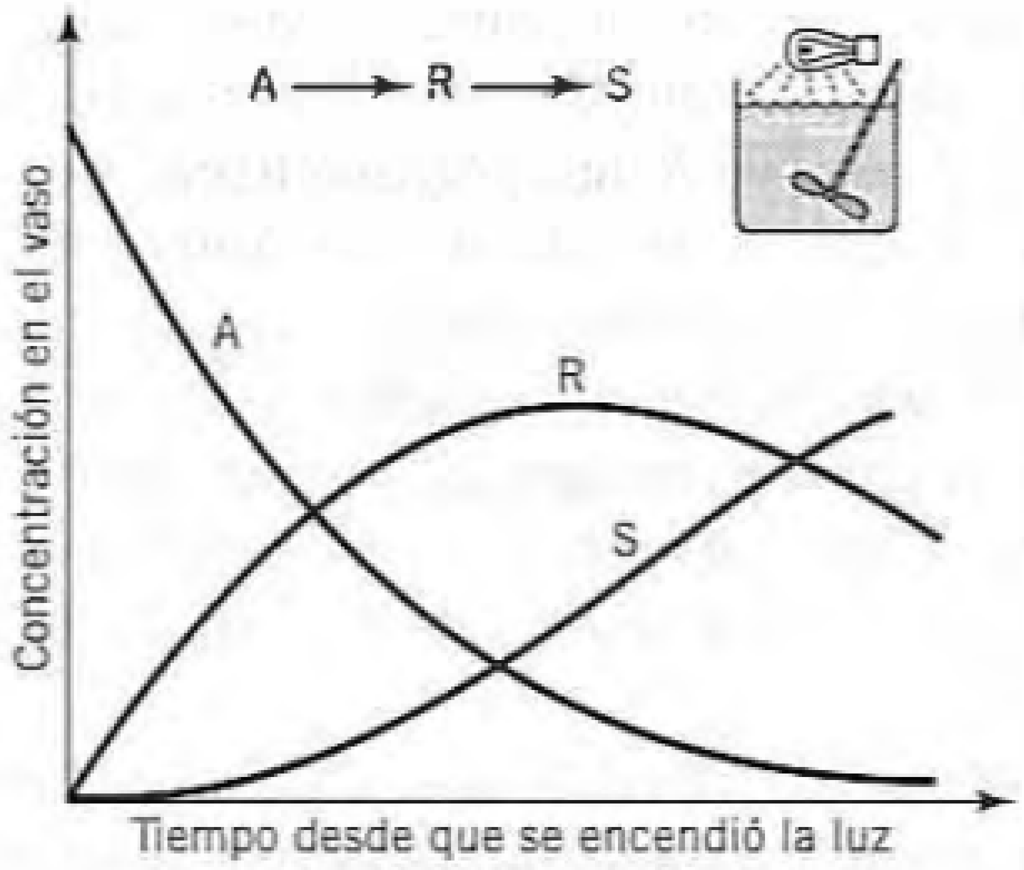


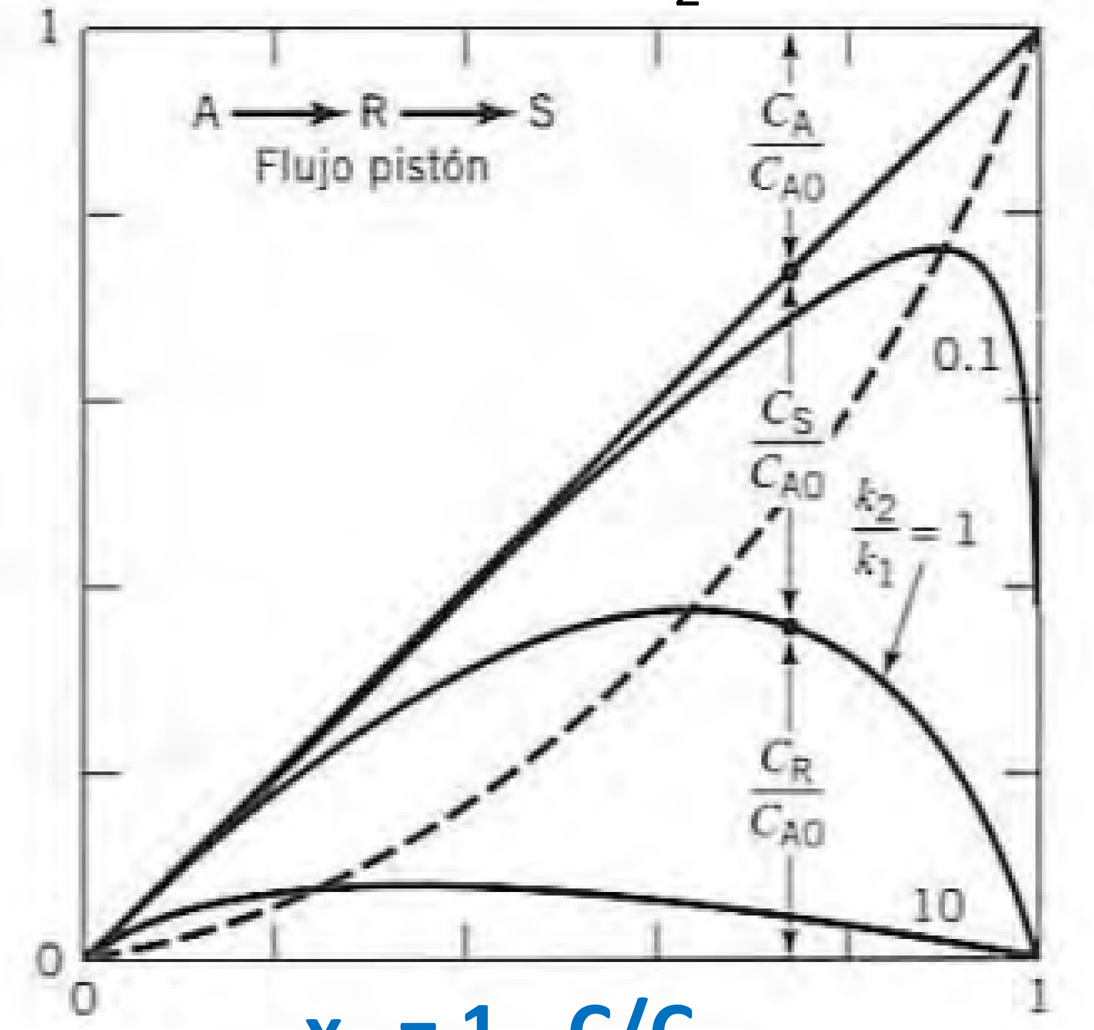
Figura 8.1. Curvas concentración-tiempo si el contenido del vaso de precipitados es irradiado uniformemente

Estudio cuantitativo para reacciones en serie. Método gráfico

$$A \xrightarrow[k_1]{} R \xrightarrow[k_2]{} S$$

Reactor de Flujo en Pistón

C/C_{A0}



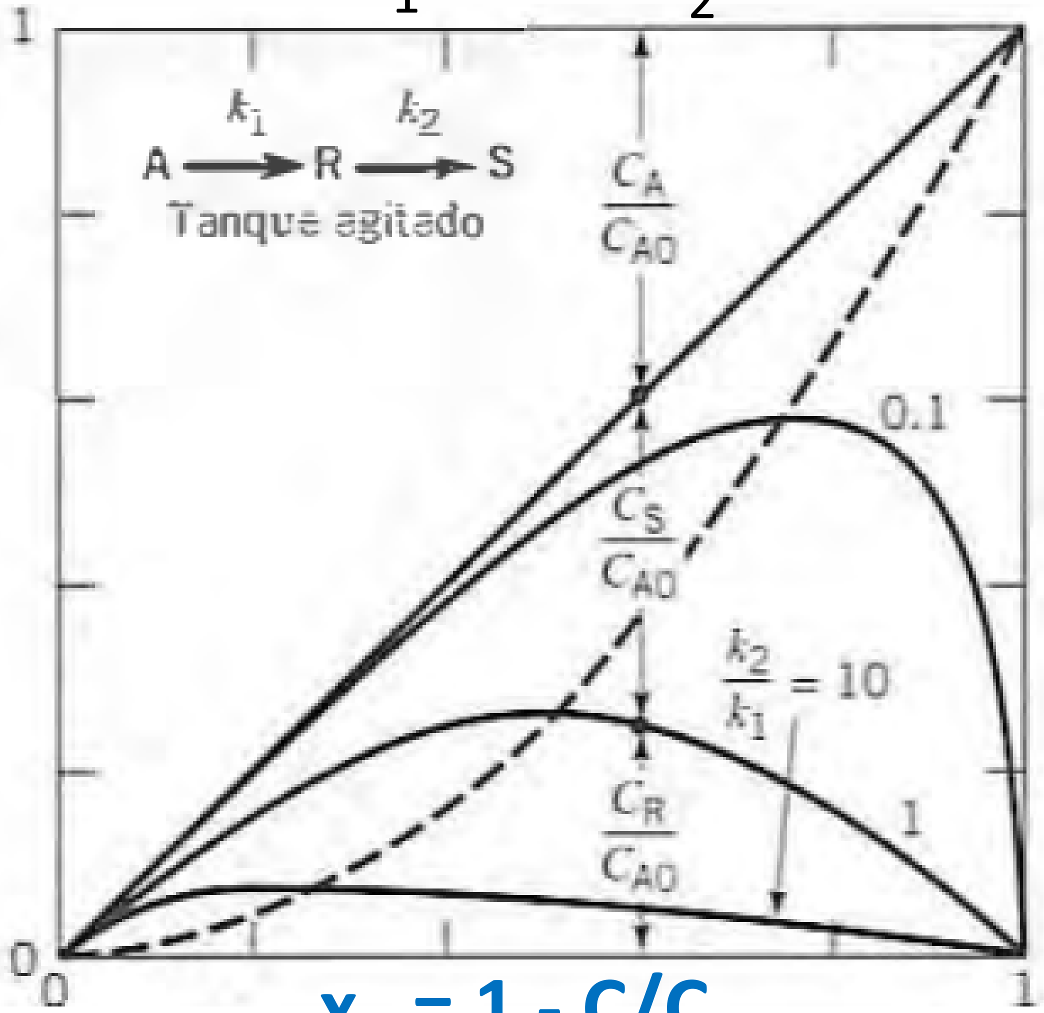
$x_A = 1 - C/C_{A0}$

$$\frac{C_{Rmax}}{C_{A0}} = \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^{k_2/(k_2-k_1)}$$

Reactor de Mezcla Completa

$$A \xrightarrow{k_1} R \xrightarrow{k_2} S$$

C/C_{A0}



$x_A = 1 - C/C_{A0}$

$$\frac{C_{Rmax}}{C_{A0}} = \frac{1}{\left(\sqrt{\frac{k_2}{k_1}} + 1\right)^2}$$

Ejercicio de aplicación:

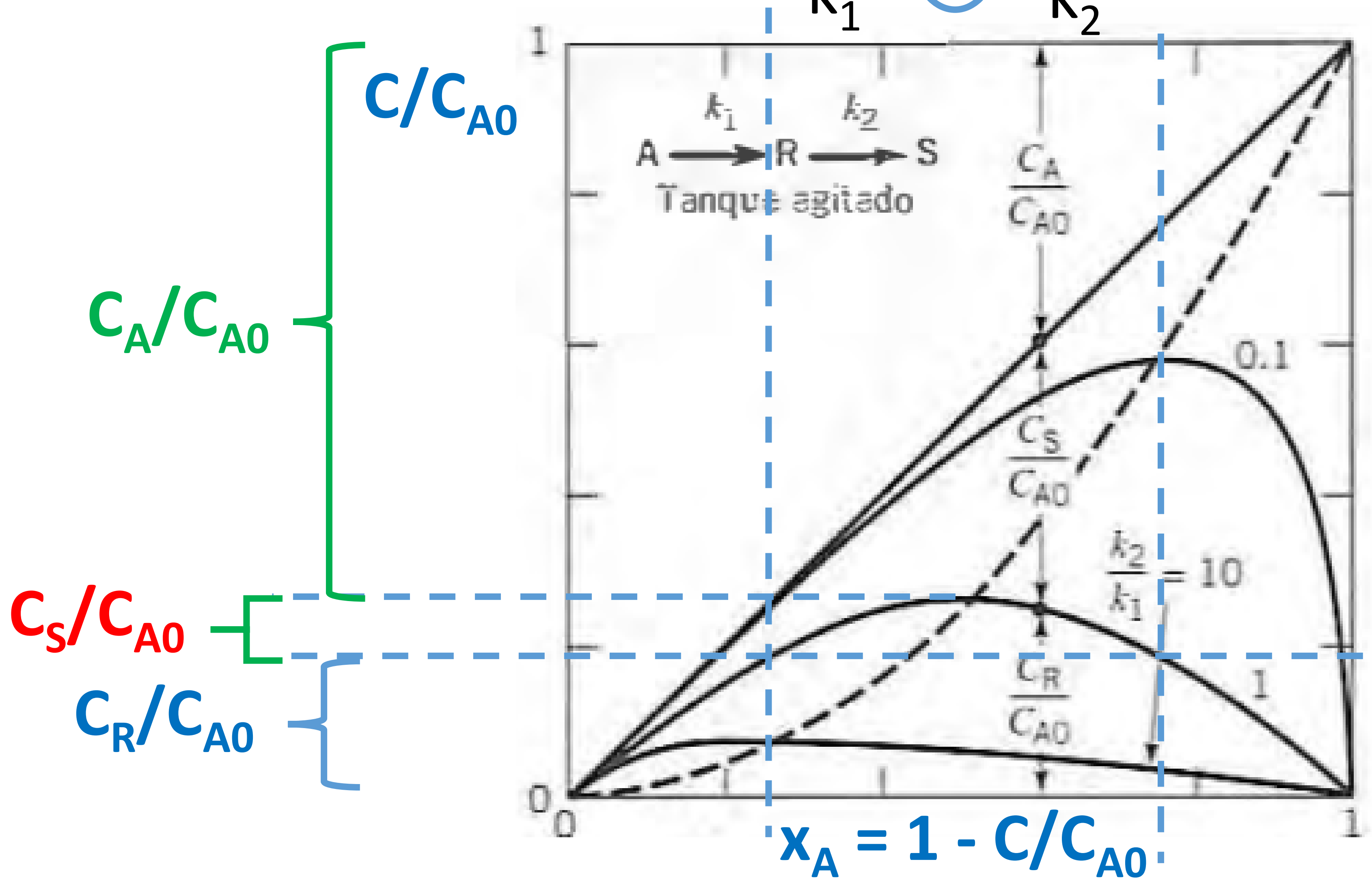
Un reactor de mezcla completa se alimenta con el reactante A puro (C_{A0} = 100), se forman las sustancias R y S, y se encuentran las siguientes concentraciones de salida:

	C_A	C_R	C_S
Experiencia 1	75	18	7
Experiencia 2	25	18	57

a) Determine un esquema cinético para ajustar estos datos.
b) Calcule la conversión que debe mantenerse en un reactor de mezcla completa para hacer máximo C_R y determine el valor de C_{Rmax}.

Reactor de Mezcla Completa

$$A \xrightarrow{k_1} R \xrightarrow{k_2} S$$



$$\frac{C_{Rmax}}{C_{A0}}(MC) = \frac{1}{\left(\sqrt{\frac{k_2}{k_1}}+1\right)^2}$$

$$\frac{C_{Rmax}}{C_{A0}}(MC) = 0.25$$

Reacciones irreversibles en serie- paralelo

$$A \xrightarrow[+B,\ k_1]{} R \xrightarrow[+B,\ k_2]{} S$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_1 C_A C_B$$

$$\frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A C_B - k_2 C_R C_B$$

$$-\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A C_B + k_2 C_R C_B$$

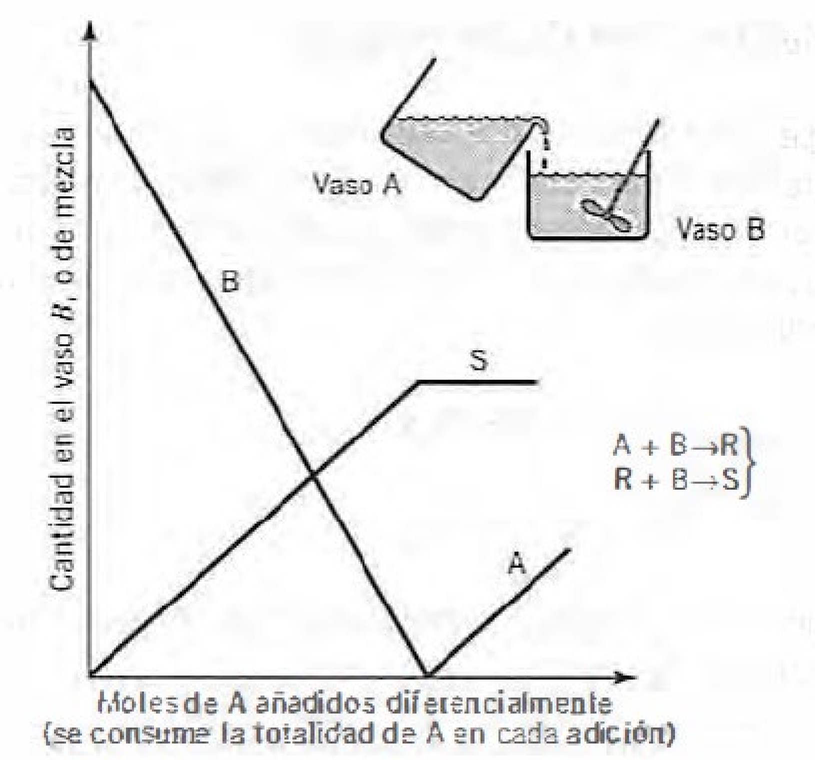
$$\frac{dC_S}{dt} = k_2 C_R C_B$$

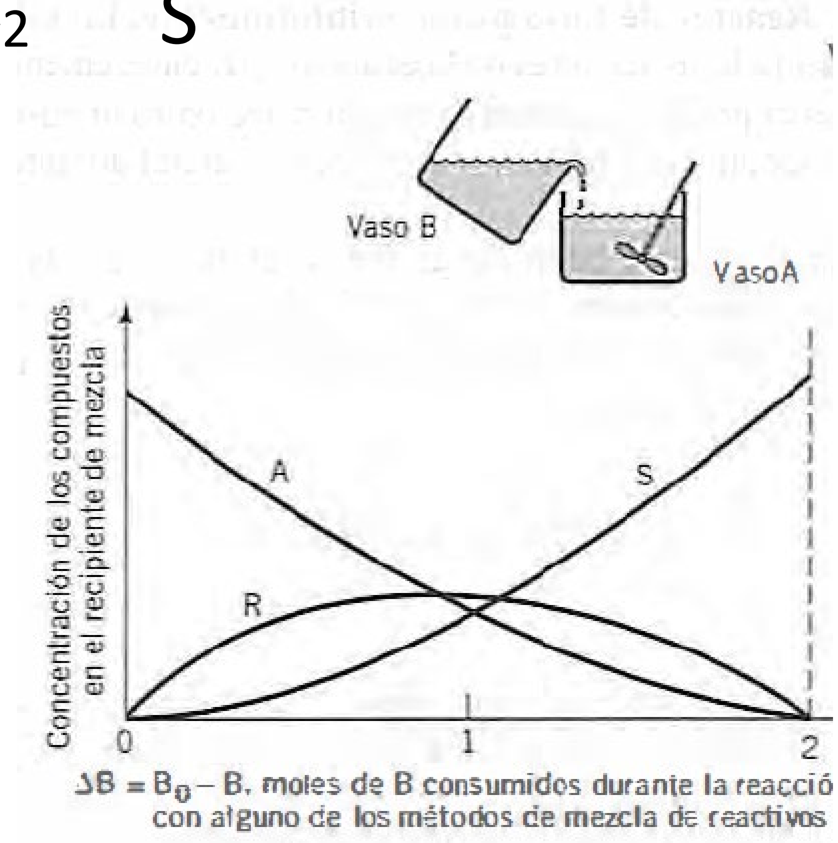
$$-\Delta C_A = \Delta C_R + \Delta C_S$$

$$-\Delta C_B = \Delta C_R + 2\Delta C_S$$

$$A + B \xrightarrow{k_1} R \xrightarrow{+B,\ k_2} S$$

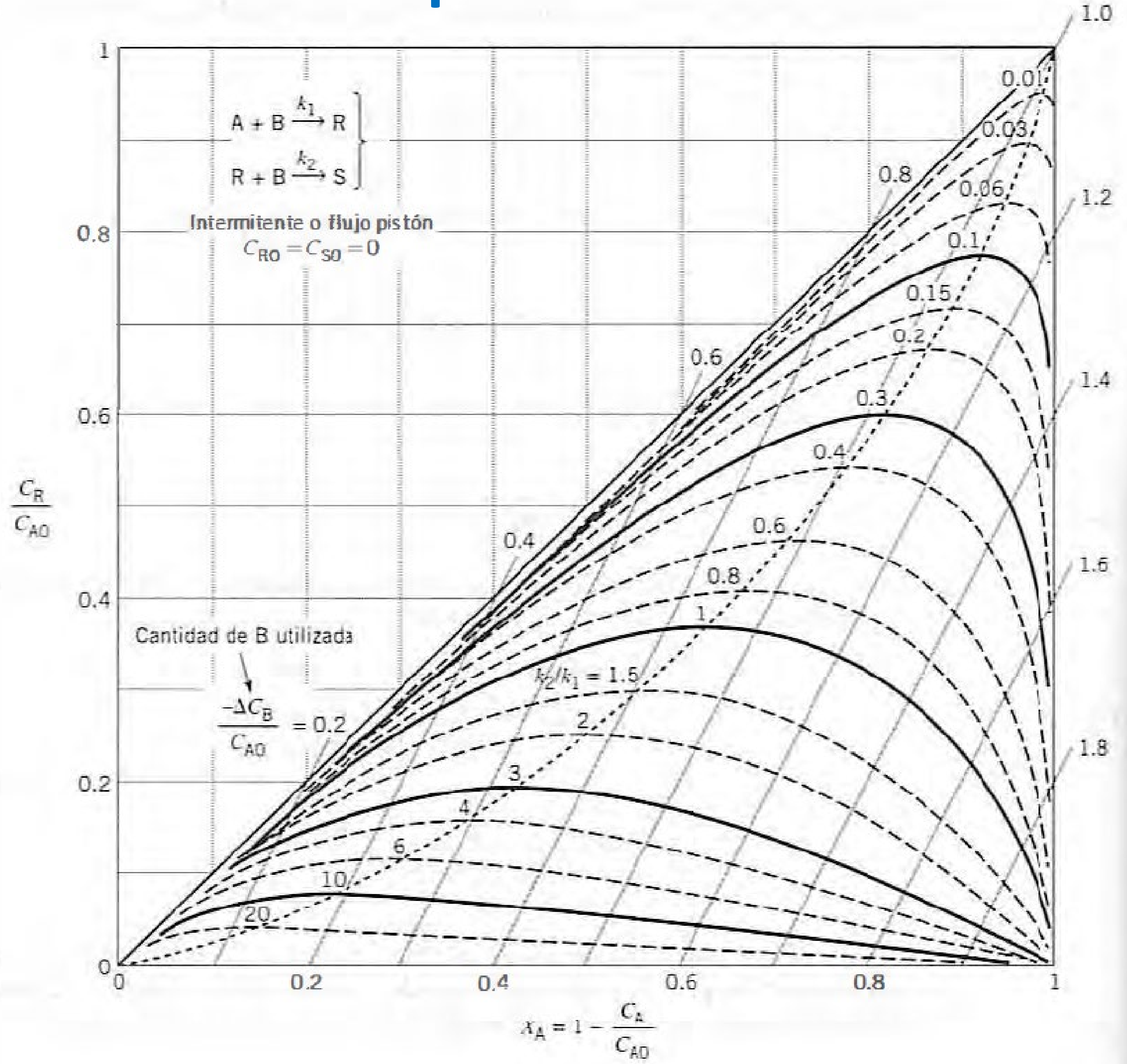
$$B \xrightarrow{+A,\ k_1} R$$
$$B \xrightarrow{+R,\ k_2} S$$





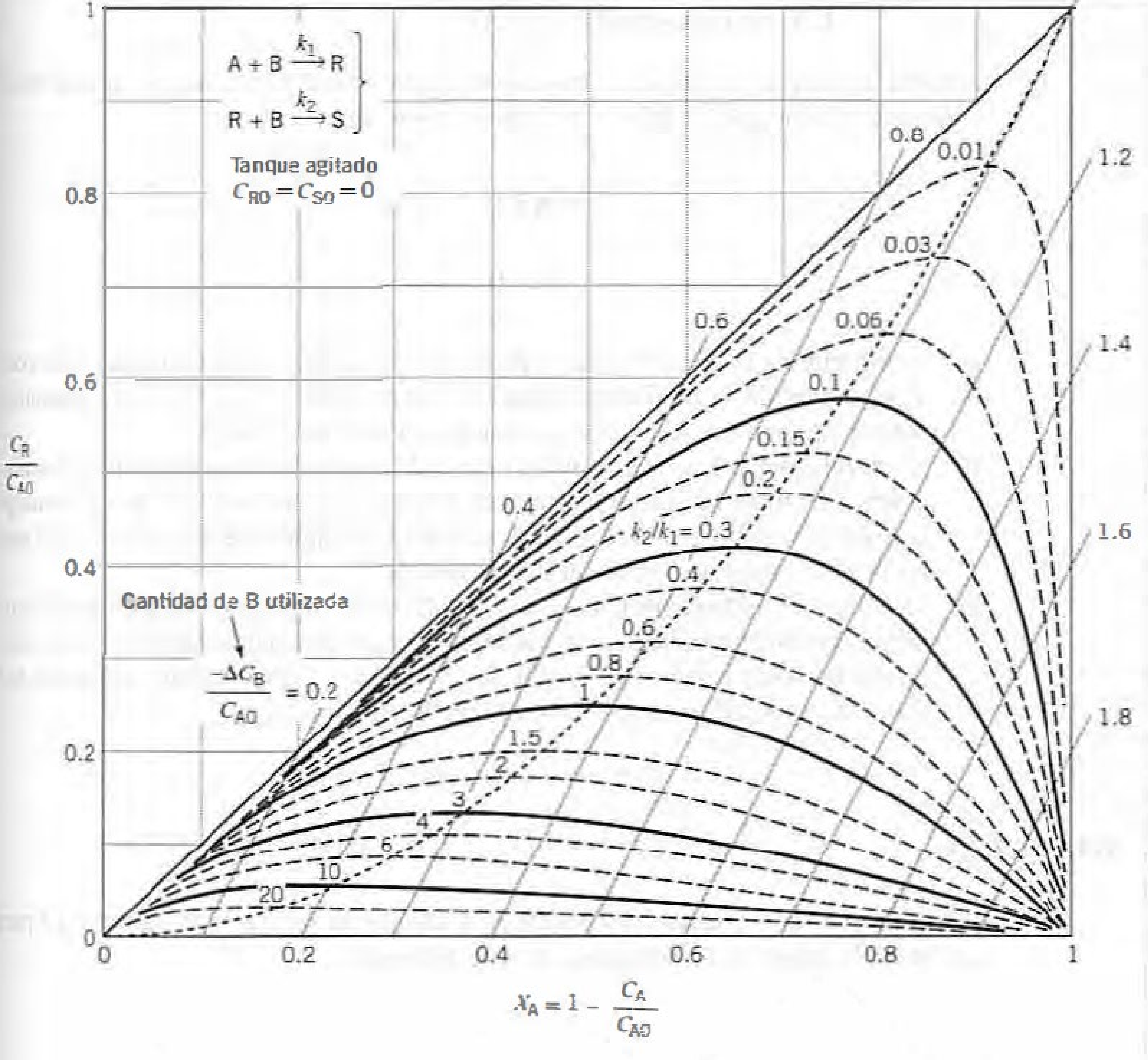
Conviene trabajar con pequeños agregados de B al reactivo A, o con mezcla rápida de A y B.

Estudio cuantitativo para reacciones en serie- paralelo



Reactor de Flujo en Pistón o discontinuo

Reactor de Mezcla Completa



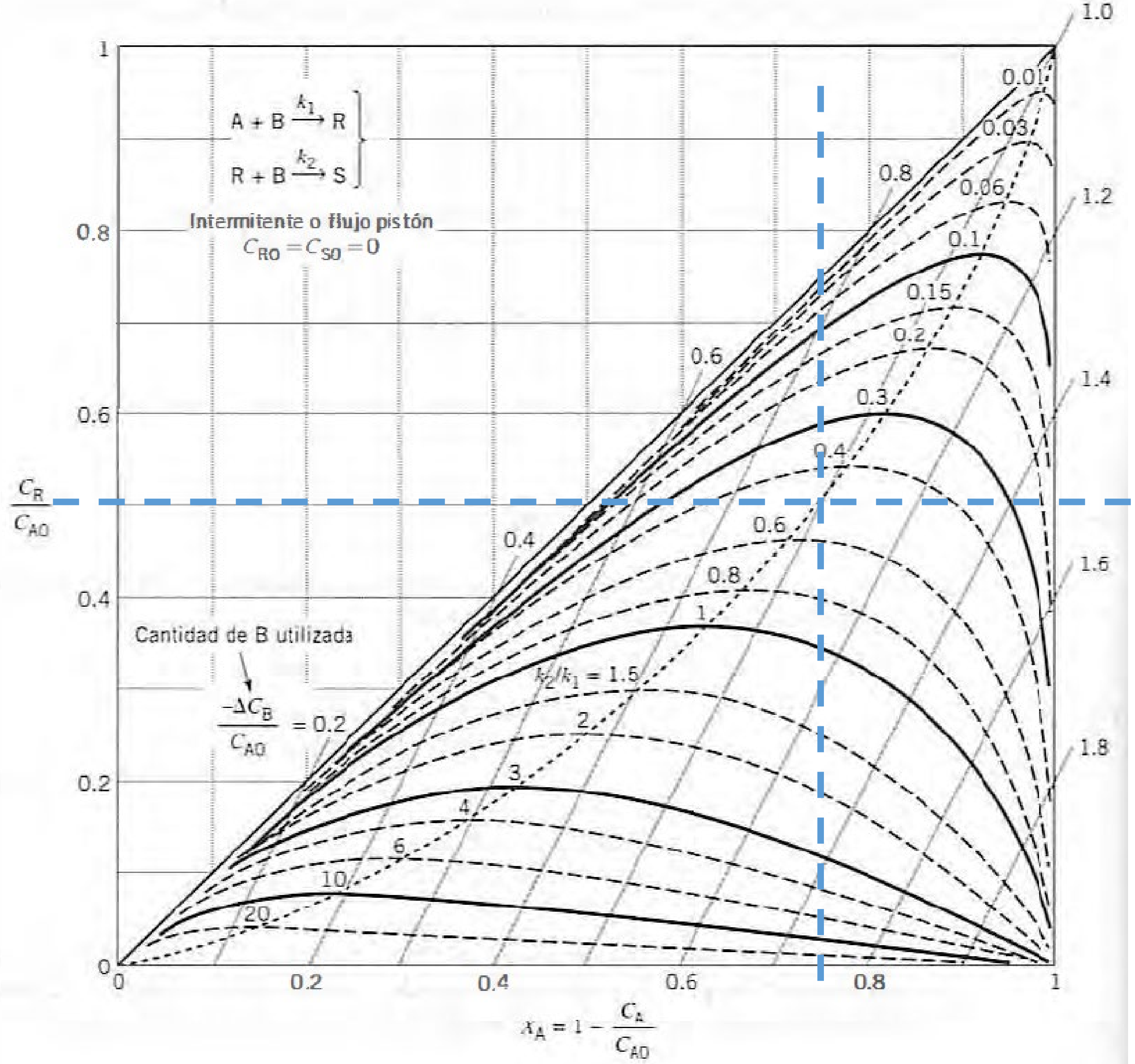
Ejercicio de aplicación

Considerar las reacciones elementales siguientes

$$A + B \xrightarrow{k_1} R$$

$$R + B \xrightarrow{k_2} S$$

Se añaden a la vez 1 mol de A y 1 mol de B y se mezclan en un matraz. La reacción es muy rápida y se efectúa la conversión antes de que pueda realizarse cualquier medida de la velocidad. Al analizar los productos de reacción se encuentra que hay 0,25 mol de S ¿Qué se puede decir acerca de k_2/k_1?



$$-\Delta C_B = \Delta C_R + 2\Delta C_S$$

$$-\Delta C_A = \Delta C_R + \Delta C_S$$

$$-\Delta C_B = 1 = \Delta C_R + 2x0.25$$

$$\Delta C_R = 0.5$$

$$-\Delta C_A = 0.5 + 0.25$$
$$= 0.75$$

$$\boldsymbol{\frac{k_2}{k_1} = 0.5}$$