



**REACTORES QUÍMICOS – TF 3341**  
**Trimestre abril-julio de 2009**  
**Ejercicios para el primer parcial**

**PROBLEMA 1:** La oxidación en fase gas de NO a NO<sub>2</sub> es un paso clave en la producción de ácido nítrico. La reacción es de tercer orden irreversible:  $-r_{\text{NO}} = k_{\text{NO}} C_{\text{NO}}^2 C_{\text{O}_2}$   $k_{\text{NO}} = 1,4 \times 10^4 \text{ m}^6 \text{ kmol}^{-2} \text{ s}^{-1}$  a 20 °C.

Calcule el volumen de un reactor de flujo pistón (FPI) para convertir el 60% de NO de una corriente de alimentación compuesta por 11% molar de NO, 8% de O<sub>2</sub> y 81% de N<sub>2</sub>. El reactor opera a 20 °C y 6 atm de presión y el flujo total de la corriente de entrada, medido a estas condiciones, es 2.000 m<sup>3</sup>/h. Suponga gas ideal y proceso a P y T constantes.

**PROBLEMA 2:** La siguiente reacción, reversible y elemental, se lleva a cabo en fase líquida a temperatura constante en dos reactores TAC de igual volumen, colocados en serie  $A \xrightleftharpoons[k_I]{k_D} B$ .

Si en la primera etapa (o reactor) la reacción llega al 50% de la conversión de equilibrio, calcule los flujos de A y de B a la salida del segundo reactor bajo las siguientes condiciones:

- Si todo el flujo que sale del primer reactor se alimenta al segundo.
- Si se extrae todo el componente B entre etapas.
- Si se extrae el 50% del componente B entre etapas.

$$-r_A = k_D \left( C_A - \frac{C_B}{K_{\text{eq}}} \right) \quad F_{A0}=1 \text{ mol/min} \quad F_{B0}=0 \quad v_0=1 \text{ L/min} \quad K_{\text{eq}}=1 \quad k_D=0,2 \text{ min}^{-1}$$

**PROBLEMA 3:** Se alimenta butanol (B) a un reactor semibatch que contiene acetato de etilo (A) para producir acetato de butilo (C) y etanol (D).

La reacción es en fase líquida, elemental, reversible y puede expresarse como:  $A + B \xrightleftharpoons[k_I]{k_D} C + D$

La reacción se lleva a cabo isotérmicamente a 300 K. A esta temperatura la constante de equilibrio tiene un valor de 1,08 y la constante de la reacción directa es de  $9 \times 10^{-5} \text{ L/mol s}$ .

Se carga inicialmente el reactor con 200 L de una solución de acetato de etilo a una concentración de 8 mol/L. Si se alimenta butanol con una concentración de 10 mol/L, a una velocidad de 0,05 L/s por un período de 5 horas desde el comienzo de la operación del reactor:

- Calcule y grafique las concentraciones de A, B, C y D para las primeras 6 horas de reacción.
- Si el tiempo muerto entre sucesivas corridas de semibatch es 1 hora, calcule el tiempo de operación del reactor (tiempo de reacción) que maximice la velocidad de producción de acetato de butilo. Haga sus cálculos para un período de 30 días.
- Simule la operación del reactor si se incrementa la constante de velocidad directa en un factor de 100. Repita todos los cálculos y compare los resultados con los obtenidos en los apartados (a) y (b). Justifique su respuesta.

NOTA: Suponga que la densidad se mantiene constante.

**PROBLEMA 4:** Para la reacción  $A \longrightarrow B + C$ , se registraron los siguientes datos:

$x_A$	0	0,2	0,4	0,5	0,6	0,8	0,9
$-r_A \text{ (mol/dm}^3 \cdot \text{min)}$	10	16,67	50	50	50	12,5	9,09

Si la velocidad molar de entrada de A es 300 mol/min,

- ¿Qué volúmenes de TAC y FPI se necesitan para alcanzar una conversión de 40%?
- ¿En qué intervalos de conversiones serían idénticos los volúmenes de los reactores TAC y FPI?
- ¿Qué conversión máxima se puede alcanzar con un reactor TAC de 10,5 dm<sup>3</sup>?
- ¿Qué conversión se puede alcanzar si un TAC de 2,4 dm<sup>3</sup> va seguido en serie de un FPI de 7,2 dm<sup>3</sup>?

**PROBLEMA 5:** Haga una comparación de diferentes combinaciones de reactores FPI y TAC en serie (TAC-TAC, FPI-FPI, TAC-FPI y FPI-TAC) para la reacción elemental en fase líquida:  $A + 1.5B \longrightarrow C + 0.6D$

La conversión final que se desea alcanzar es de 80% con una conversión intermedia de 40%. Las condiciones de operación son las siguientes:

$$F_{A0} = 1.000 \text{ mol/h}$$

$$C_{A0} = 2 \text{ mol/L}$$

$$\theta_B = 2; \theta_C = 0,1; \theta_D = 0,2 \text{ y } \theta_I = 0.5$$

Temperatura = 600 K

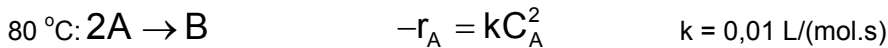
$$k(T) = A \exp(-E/R.T). A = 3,1 \times 10^9. E = 24.000 \text{ cal/mol}$$

**PROBLEMA 6:** La siguiente reacción elemental e irreversible se lleva a cabo en fase líquida a temperatura constante en un reactor por carga de volumen constante V:  $2A \longrightarrow P$   $k = 0,005 \text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{min})$

Concentración inicial de A en el reactor:  $C_{A,0} = 1 \text{ mol/L}$

Si por cada corrida del reactor se toman 18 minutos para el proceso de llenado, limpiado y posterior vaciado ¿cuál debe ser la conversión final de A por corrida, para maximizar la producción de P?. Haga sus cálculos en base a un día de 24 horas.

**PROBLEMA 7:** Se alimenta una solución líquida A de concentración  $C_{Ai} = 1 \text{ mol/L}$  a un reactor tipo tanque agitado inicialmente vacío de 200 L de capacidad, donde reacciona de acuerdo a la siguiente ley de velocidad, a la temperatura de



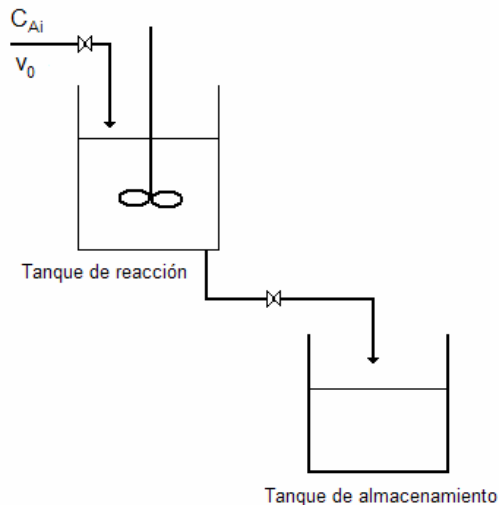
El flujo de entrada al reactor es  $v_0 = 0,2 \text{ L/s}$ .

En el momento en que se llena el reactor, se suspende la alimentación de reactivo y, una vez que se alcanza una concentración  $C_A = 0,1 \text{ mol/L}$ , se comienza a vaciar el reactor hacia un tanque de almacenamiento donde se detiene la reacción.

Encuentre el tiempo y la concentración de la especie A para las siguientes condiciones:

- Al completarse el llenado del reactor.
- Al alcanzar en el tanque de reacción la concentración de  $C_A = 0,1 \text{ mol/L}$ .
- Cuándo se ha vaciado la mitad del tanque.

Considere que el diámetro del tanque es  $D = 50 \text{ cm}$  y que el diámetro de la tubería de descarga es  $d = 2 \text{ in}$ . Suponga despreciables las pérdidas de energía mecánica y que todo el proceso se efectúa a presión y temperatura constantes.

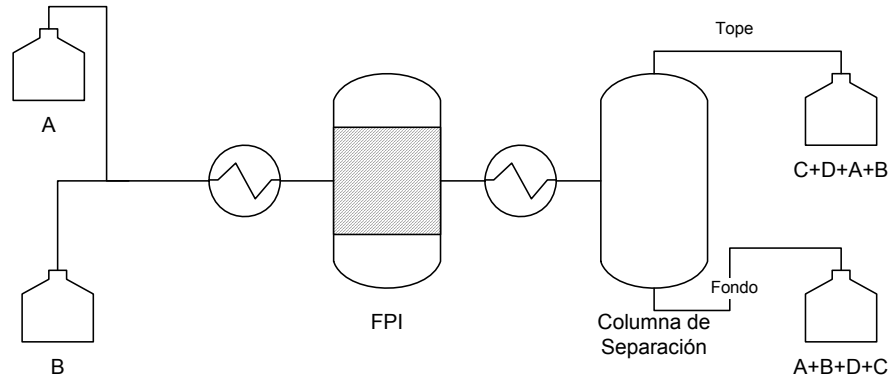


**PROBLEMA 8:** Considere el esquema de la planta mostrado en la figura, en donde se quiere llevar a cabo la siguiente reacción reversible elemental en fase gaseosa:  $A + 0,5B \leftrightarrow 0,7C + 0,6D$

En la línea de alimentación del reactor ingresa A con un flujo molar de 5000 mol/h y B con una relación de flujo de 1,5. El reactor opera isotérmicamente a una temperatura de 550 K y una presión de 60 atm. Las constantes de velocidad a la temperatura de operación vienen dadas por  $k_D=34,429$  y  $k_I=3,306$  (en las unidades correspondientes). Las relaciones de separación son:  $S_A=0,01$ ;  $S_B=0,02$ ;  $S_C=0,8$  y  $S_D=0,06$ .

- Determine el volumen necesario para alcanzar una pureza de C de 88,1 % en el tope de la columna si se desea utilizar un reactor FPI.
- Si se dispone de un reactor TAC del mismo volumen que el calculado en el apartado (a), cuál sería la conversión alcanzada.

- c) Si se dispone dos reactores, un TAC de 200 L y un FPI de 200 L ¿cuál sería el mejor arreglo de reactores en serie? Determine la conversión final e intermedia para las diferentes combinaciones.



**PROBLEMA 9:** El producto orgánico C se produce a partir de la materia prima A ( $PM_A=150$ ) que se consigue con 97% de pureza (es decir, el resto es un inerte de peso molecular  $PM_I=120$  y trazas de C y D), y de B ( $PM_B=100$ ) el cual se compra puro. La reacción (en fase gas) que ocurre es la siguiente:  $A+0,55B \rightleftharpoons 1,2C+0,5D$

Para determinar la cinética de la reacción, se hicieron una serie de pruebas en un reactor TAC de laboratorio, obteniéndose los siguientes resultados:

**Datos experimentales de cinética para reactor TAC ( $V = 4.300 \text{ L}$ )**

T (K)	P (atm)	$F_{A0}$ (mol/h)	$\theta_B$	$\theta_C$	$\theta_D$	$\theta_I$	$K_{Equil}$	$x_A$	$n_A$	$n_C$
540	38	9592	0,8	0,3	0,1	1	7,45	0,2	0,9	0
540	38	2992	1,4	0,3	0,3	1	7,45	0,4	0,9	0
540	38	701	2,2	0,3	0,5	1	7,45	0,6	0,9	0
545	38	10449	0,8	0,3	0,1	1	7,02	0,2	0,9	0
545	38	3799	1,6	0,3	0,3	1	7,02	0,4	0,9	0
545	38	804	2,4	0,3	0,5	1	7,02	0,6	0,9	0
550	38	11327	0,8	0,3	0,1	1	6,62	0,2	0,9	0
550	38	4045	1,6	0,3	0,3	1	6,62	0,4	0,9	0
550	38	747	2,4	0,3	0,5	1	6,62	0,6	0,9	0
555	38	12215	0,8	0,3	0,1	1	6,24	0,2	0,9	0
555	38	4273	1,6	0,3	0,3	1	6,24	0,4	0,9	0
555	38	654	2,4	0,3	0,5	1	6,24	0,6	0,9	0
560	38	13100	0,8	0,3	0,1	1	5,90	0,2	0,9	0
560	38	4476	1,6	0,3	0,3	1	5,90	0,4	0,9	0
560	38	517	2,4	0,3	0,5	1	5,90	0,6	0,9	0

Determine la cinética que rige el problema.

**PROBLEMA 10:** Determine el orden de reacción de la descomposición en fase gaseosa de un reactivo A que ocurre a  $300^\circ\text{C}$  según la expresión  $A \rightarrow B+2C$

La reacción se efectuó en un laboratorio empleando un reactor por carga el cual opera a  $V$  constante. Se registró la presión total en cada momento durante la reacción. Inicialmente el reactor estaba cargado con A puro.

t(s)	0	2,5	5	10	15	20
$P_{total}$ (mm Hg)	98,7	138,2	164,5	207,9	235,5	255,3

**PROBLEMA 11:** La reacción en fase gas reversible de primer orden  $A \rightleftharpoons B$  se lleva a cabo en un reactor FPI que consta de 100 tubos iguales montados en paralelo. Actualmente el reactor trabaja a una temperatura de  $250^\circ\text{C}$  y a una presión de 10 atm. Bajo estas condiciones alimentando al reactor 150 mol/s de A se obtiene una producción de 100 mol/s de B.

La cinética de la reacción es:

$$-r_A = k_D \left( C_A - \frac{C_B}{K_{eq}} \right) \quad k_D = A_1 \exp \left( -\frac{E_1}{RT} \right) \quad K_{eq} = 2,5 \quad A_1 = 2,5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} \quad E_1 = 140.000 \text{ J/mol}$$

Para las condiciones de operación descritas, determine:

- El volumen del reactor FPI.
- La conversión de equilibrio.

c) Haciendo un gran esfuerzo publicitario, el Departamento de Comercialización de la empresa logró aumentar las ventas de producto B en 20%. Por esta razón, el Jefe de Planta le solicita a usted analizar si es posible atender esta nueva demanda del mercado (120 mol/s de B) con los equipos y las instalaciones actuales. Las alternativas a considerar son (3 puntos):

- Variar la presión de trabajo del reactor.
- Variar el caudal de alimentación de A al reactor.

Las modificaciones en las condiciones de operación están limitadas por las características propias de la planta. Así, el reactor solo puede operar a una presión entre 5 y 15 atm, a una temperatura entre 200 y 300 °C y el caudal de alimentación debe estar comprendido entre 100 y 200 mol/s.

**Nota:** En su análisis, considere que sólo se puede cambiar uno de los tres parámetros a la vez.

**PROBLEMA 12:** Se realizaron pruebas cinéticas en un reactor tipo TAC isotérmico de 5 L para la siguiente reacción irreversible en fase líquida  $2A + 3B \rightarrow C + 2D$

Todas las pruebas se llevaron a cabo variándose el flujo de entrada, la temperatura, la concentración inicial de A y la relación de flujo de B. Los resultados obtenidos se muestran en la tabla siguiente. Determine la cinética de reacción: Ordenes de reacción ( $n_A$  y  $n_B$ ), energía de activación (E) y el factor preexponencial (A)

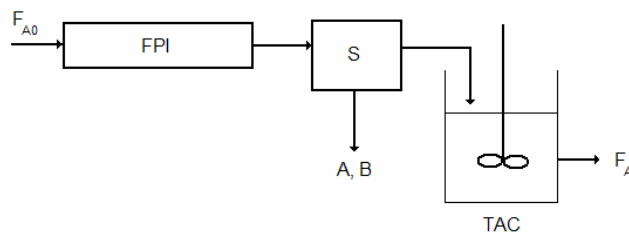
T (K)	$C_{A0}$ (mol/L)	$C_A$ (mol/L)	$F_{A0}$ (mol/h)	$\theta_B$
500	0,980	0,784	152,19	1
500	1,239	0,743	190,65	1,5
500	1,496	0,598	222,81	2
600	0,296	0,237	55,05	1
600	0,374	0,224	68,83	1,5
600	0,452	0,181	80,67	2

**PROBLEMA 13:** Se dispone de un reactor FPI en serie con un reactor TAC, para efectuar la siguiente reacción en fase gaseosa, elemental y reversible a temperatura constante  $A \xrightleftharpoons[k_I]{k_D} 2B$

$$-r_A = 0,9 \left( C_A - \frac{C_B^2}{6} \right) \quad F_{A0} = 1 \text{ mol/h} \quad C_{A0} = 1 \text{ mol/L} \quad V_{TAC} = V_{FPI} = 1 \text{ L}$$

Entre los dos reactores está ubicado un separador que retira, de la corriente de salida del FPI, el 95% molar de B y el 5% de A, calcule:

- La conversión de A a la salida del FPI.
- El flujo de A a la salida del TAC ( $F_A$ ).



**PROBLEMA 14:** La reacción irreversible en fase gas  $2A \rightarrow B$  se lleva a cabo en un reactor tipo FPI que trabaja a una temperatura de 150 °C y a una presión de 5 atm. Si se alimentan 30 mol/min de A para producir 10 mol/min de B ¿qué volumen de reactor se requiere?.

¿Recomendaría usted diluir la alimentación con inertes para favorecer este proceso?.

Para determinar la cinética, previamente se hicieron experimentos en un reactor por lotes (TAD) obteniéndose los siguientes datos durante el curso de la reacción:

t (min)	0	10	20	30	40	60	80
$C_A$ (mol/L)	0,2	0,1808	0,1632	0,1472	0,1328	0,1088	0,0912