

## Práctica No. 2

### REACTOR SEMIBATCH

#### Objetivos:

Conocer lo que es el reactor semibatch y sus aplicaciones.

Entender el principio del método de seguimiento de la reacción utilizando el espectrofotómetro.

Hacer uso de la cinética encontrada anteriormente y ver la importancia que tiene esto para el diseño y/o simulación de un reactor.

Entender lo que es un modelo y su obtención.

Usar un modelo teórico y comparar los resultados con los obtenidos en el laboratorio.

#### Cálculos y Resultados.

Reportar los datos experimentales.

En el laboratorio obtuvimos los siguientes datos:

| tiempo (min) | Absorbancia |
|--------------|-------------|
| 6            | 0.058       |
| 8            | 0.061       |
| 10           | 0.063       |
| 12           | 0.084       |
| 14           | 0.092       |
| 16           | 0.102       |
| 17           | 0.11        |
| 18           | 0.121       |
| 19           | 0.126       |
| 20           | 0.131       |
| 21           | 0.145       |
| 22           | 0.16        |
| 23           | 0.161       |
| 24           | 0.175       |
| 25           | 0.176       |

|    |       |
|----|-------|
| 26 | 0.179 |
| 27 | 0.179 |
| 29 | 0.181 |
| 31 | 0.194 |
| 33 | 0.199 |
| 35 | 0.201 |
| 37 | 0.206 |
| 39 | 0.212 |
| 41 | 0.216 |
| 43 | 0.212 |
| 45 | 0.221 |
| 47 | 0.223 |
| 49 | 0.231 |
| 51 | 0.234 |
| 56 | 0.24  |
| 61 | 0.244 |

Determinar la cantidad de moles de cloruro de sodio generados en el reactor con respecto al tiempo, a partir de los datos experimentales.

Mediante los datos de la curva de calibración obtenidos de la practica anterior obtenemos:

|                      |
|----------------------|
| CURVA DE CALIBRACION |
|----------------------|

| CONCENTRACION | ABSORBANCIA |
|---------------|-------------|
| 7.00E-06      | 0.543       |
| 6.30E-06      | 0.513       |
| 5.60E-06      | 0.464       |
| 4.90E-06      | 0.38        |
| 4.20E-06      | 0.361       |
| 3.50E-06      | 0.252       |
| 2.80E-06      | 0.221       |
| 2.10E-06      | 0.141       |
| 1.40E-06      | 0.108       |
| 7.00E-07      | 0.031       |

Con estos datos y con la grafica que muestro a continuación obtenemos la siguiente ecuación que nos permite calcular la concentración de violeta cristal en función de la absorbancia.

$$CA = 1 \times 10^{-5} \text{ Abs} - 3 \times 10^{-7}$$

Calculando el valor de la concentración podemos calcular el numero de moles presentes del violeta cristal mediante la siguiente ecuación:  $n_{\text{presentes}} = CA(V_0 + Q \cdot t)$

Además podemos también calcular el numero de moles adicionados mediante esta ecuación:  $n_{\text{alimentados}} = Q \cdot CA_0 \cdot t$ .

Con estos datos obtenidos y con la observación que la estequiometria es de 1 a 1 tenemos:  $n_{\text{consumidos}} = n_{\text{NaCl formados}} = n_{\text{alimentados}} - n_{\text{presentes}}$

Con esto obtenemos:

| tiempo (min) | n presentes | n alimentados | n formados |
|--------------|-------------|---------------|------------|
| 2            | 1.456E-07   | 0.00000015    | 4.4E-09    |
| 4            | 0.000000216 | 0.0000003     | 8.4E-08    |
| 6            | 7.84E-08    | 0.00000045    | 3.716E-07  |
| 8            | 8.99E-08    | 0.0000006     | 5.101E-07  |
| 10           | 0.000000099 | 0.00000075    | 6.51E-07   |
| 12           | 1.674E-07   | 0.0000009     | 7.326E-07  |
| 14           | 1.984E-07   | 0.00000105    | 8.516E-07  |
| 16           | 2.376E-07   | 0.0000012     | 9.624E-07  |
| 17           | 0.000000268 | 0.000001275   | 1.007E-06  |
| 18           | 3.094E-07   | 0.00000135    | 1.0406E-06 |
| 19           | 3.312E-07   | 0.000001425   | 1.0938E-06 |
| 20           | 3.535E-07   | 0.0000015     | 1.1465E-06 |
| 21           | 4.0825E-07  | 0.000001575   | 1.1668E-06 |
| 22           | 0.000000468 | 0.00000165    | 1.182E-06  |
| 23           | 4.7815E-07  | 0.000001725   | 1.2469E-06 |
| 24           | 5.365E-07   | 0.0000018     | 1.2635E-06 |
| 25           | 5.475E-07   | 0.000001875   | 1.3275E-06 |

|    |             |             |            |
|----|-------------|-------------|------------|
| 26 | 5.662E-07   | 0.00000195  | 1.3838E-06 |
| 27 | 5.7365E-07  | 0.000002025 | 1.4514E-06 |
| 29 | 5.9645E-07  | 0.000002175 | 1.5786E-06 |
| 31 | 6.642E-07   | 0.000002325 | 1.6608E-06 |
| 33 | 7.0135E-07  | 0.000002475 | 1.7737E-06 |
| 35 | 7.2675E-07  | 0.000002625 | 1.8983E-06 |
| 37 | 7.656E-07   | 0.000002775 | 2.0094E-06 |
| 39 | 8.099E-07   | 0.000002925 | 2.1151E-06 |
| 41 | 8.463E-07   | 0.000003075 | 2.2287E-06 |
| 43 | 8.463E-07   | 0.000003225 | 2.3787E-06 |
| 45 | 9.0725E-07  | 0.000003375 | 2.4678E-06 |
| 47 | 9.3605E-07  | 0.000003525 | 2.589E-06  |
| 49 | 9.9495E-07  | 0.000003675 | 2.6801E-06 |
| 51 | 1.0302E-06  | 0.000003825 | 2.7948E-06 |
| 56 | 0.000001113 | 0.0000042   | 3.087E-06  |
| 61 | 1.1877E-06  | 0.000004575 | 3.3873E-06 |

Determinar la cantidad de moles de cloruro de sodio generados en el reactor con respecto al tiempo utilizado mediante: a) el método analítico, y b) un método numérico. Realizar las conclusiones correspondientes.

Método teórico.

Para la velocidad de reacción podría usarse la siguiente expresión.

(1)

donde: (2)

las cuales al sustituirlas en la ecuación 1 resulta:

(3)

Por otra parte se tiene la ecuación siguiente que expresa la conversión de reactivo A respecto al tiempo:

(4)

la cual no puede ser integrada analíticamente. Pero se puede usar un método como el de Runge-Kuta para obtener una solución numérica. El procedimiento consiste en empezar con  $t = 0$  y calcular la conversión con incrementos sucesivos de tiempo,  $t$ . si el subíndice  $n$  representa el numero de incrementos de tiempo, se obtiene con la formula:

(5)

donde los valores de las  $k$ 's se obtiene evaluando la ecuación (4), (la cual pa fines prácticos llamaremos  $R(x,t)$ ), para valores de  $x$  y  $t$  provenientes de las expresiones:

los datos iniciales son:

con estos valores y la ecuación 4 para  $R(x, t)$  se obtiene:

Que puede resolverse numéricamente para  $x$  usando  $t$ . el volumen de la reacción en cualquier momento se obtiene con la siguiente ecuación:

y si la velocidad de alimentación es constante puede integrarse para obtener:

y evaluada queda:

Por otro lado  $R(x, t)$  esta indeterminado para  $x = 0, t = 0$ , pues no hay colorante presente. Para iniciar los cálculos, es posible estimar  $R(0, 0)$  y, por lo tanto, para después corregirlos una vez obtenido  $x$  para el primer incremento, así tenemos:

finalmente se obtiene la siguiente tabla de resultados para el método numérico.

Donde:  $X$  = moles alimentados / moles consumidos

| tiempo (min) | X       | $X_{n+1}$   | n adicionados | n formados |
|--------------|---------|-------------|---------------|------------|
| 0            | 0       | 1.46656E-05 | 0             | 0          |
| 5            | 1.5E-05 | 1.3161E-05  | 0.000000375   | 9.2024E-07 |
| 10           | 1.3E-05 | 1.23269E-05 | 0.00000075    | 1.8405E-06 |
| 15           | 1.2E-05 | 1.17613E-05 | 0.000001125   | 2.7607E-06 |
| 20           | 1.2E-05 | 1.13383E-05 | 0.0000015     | 3.681E-06  |
| 25           | 1.1E-05 | 1.10029E-05 | 0.000001875   | 4.6012E-06 |
| 30           | 1.1E-05 | 1.07266E-05 | 0.00000225    | 5.5214E-06 |
| 35           | 1.1E-05 | 1.04924E-05 | 0.000002625   | 6.4417E-06 |
| 40           | 1E-05   | 1.029E-05   | 0.000003      | 7.3619E-06 |
| 45           | 1E-05   | 1.0112E-05  | 0.000003375   | 8.2822E-06 |
| 50           | 1E-05   | 9.95356E-06 | 0.00000375    | 9.2024E-06 |
| 55           | 1E-05   | 9.81101E-06 | 0.000004125   | 1.0123E-05 |
| 60           | 9.8E-06 | 9.68162E-06 | 0.0000045     | 1.1043E-05 |
| 65           | 9.7E-06 | 9.5633E-06  | 0.000004875   | 1.1963E-05 |
| 70           | 9.6E-06 | 9.45441E-06 | 0.00000525    | 1.2883E-05 |
| 75           | 9.5E-06 | 9.35365E-06 | 0.000005625   | 1.3804E-05 |
| 80           | 9.4E-06 | 9.25995E-06 | 0.000006      | 1.4724E-05 |
| 85           | 9.3E-06 | 9.17246E-06 | 0.000006375   | 1.5644E-05 |
| 90           | 9.2E-06 | 9.09044E-06 | 0.00000675    | 1.6564E-05 |
| 95           | 9.1E-06 | 9.01329E-06 | 0.000007125   | 1.7485E-05 |

construir una grafica de moles de NaCl Vs tiempo para los datos obtenidos experimental y teóricamente (método analítico y numérico).

| TIEMPO (minutos) | Número de moles de NaCl |
|------------------|-------------------------|
| 2                | 2.63E-08                |
| 3                | 6.68E-08                |
| 4                | 1.13E-07                |
| 5                | 1.55E-07                |
| 6                | 1.92E-07                |

|    |          |
|----|----------|
| 7  | 2.74E-07 |
| 8  | 3.68E-07 |
| 9  | 4.51E-07 |
| 10 | 5.85E-07 |
| 11 | 6.23E-07 |
| 13 | 7.25E-07 |
| 15 | 1.02E-06 |
| 17 | 1.24E-06 |
| 19 | 1.49E-06 |
| 21 | 1.74E-06 |
| 23 | 1.93E-06 |
| 25 | 2.23E-06 |

| <b>TIEMPO<br/>(minutos)</b> | <b>Número de<br/>moles de<br/>NaCl</b> |
|-----------------------------|----------------------------------------|
| 1                           | 7.69E-06                               |
| 2                           | 2.34E-05                               |
| 3                           | 5.40E-05                               |
| 4                           | 9.91E-05                               |
| 5                           | 1.44E-04                               |
| 6                           | 1.97E-04                               |
| 7                           | 2.65E-04                               |
| 8                           | 3.53E-04                               |
| 9                           | 4.29E-04                               |
| 10                          | 5.55E-04                               |
| 11                          | 6.14E-04                               |
| 13                          | 7.83E-04                               |
| 15                          | 1.11E-03                               |
| 17                          | 1.37E-03                               |
| 19                          | 1.68E-03                               |
| 21                          | 1.98E-03                               |
| 23                          | 2.21E-03                               |
| 25                          | 2.56E-03                               |
| 26                          | 2.75E-03                               |
| 27                          | 2.91E-03                               |

Análisis comparativo de resultados y conclusiones.

Como podemos observar en los gráficos anteriores observamos que existe una

desviación de los datos experimentales en comparación con los datos teóricos esto pudo ser debido a la incorrecta medición de las muestras o debido quizás a que el flujo volumétrico no pudo haber permanecido constante.

También por otro lado podemos observar que la formación del NaCl varia en forma proporcional con el tiempo.

Dar por lo menos dos ejemplos de uso industrial para cada uno de los tipos de reactores semibatch (volumen variable y volumen constante).

Este tipo de reactores se utilizan en reacciones donde se producen efectos térmicos

notables ya que permite retrasar las reacciones tanto endotérmicas como exotérmicas por limitación de la concentración de uno de los reactantes manteniéndose así la reacción dentro de los límites adecuados para la transmisión de calor.

También se le utiliza cuando uno de los reactantes puede originar productos secundarios indeseables o bien cuando alguno de los reactantes es un gas de solubilidad limitada que solamente pueda entrar como alimentación a la velocidad de disolución.

### **Conclusiones.**

Es recomendable poder contar con el equipo necesario para contar con un flujo constante para así poder obtener unos datos más precisos y nos den unos resultados más apegados a la realidad y así poder satisfacer los objetivos de la práctica.

Como podemos observar en los gráficos anteriores observamos que existe una

desviación de los datos experimentales en comparación con los datos teóricos esto pudo ser debido a la incorrecta medición de las muestras o debido quizás a que el flujo volumétrico no pudo haber permanecido constante.

También por otro lado podemos observar que la formación del NaCl varia en forma proporcional con el tiempo.

### **BIBLIOGRAFÍA.**

Ingeniería de la cinética Química

J.M. Smith

Ed. Ceca

Laboratorio de Ingeniería de Reactores

FIQ