

PROBLEMAS DE RDTA 1-12

1.- En una reacción $A \rightarrow B$ en fase gaseosa y a temperatura y presión constantes en un RDTA, desaparece el 20% de reactivo A en 20 min cuando se parte tanto de $C_{A0} = 0.04$ mol/L como de $C_{A0} = 0.08$ mol/L. Obtener la ecuación cinética a esa temperatura.

2.- Una reacción homogénea en fase gas con estequiometría $A \rightarrow 2.5R$ y cinética de primer orden se lleva a cabo en un RDTA a presión y temperatura constantes a 2 atm de presión con un 20% de inertes. Determinar la constante de velocidad de reacción sabiendo que en 20 minutos el volumen aumenta un 60%.

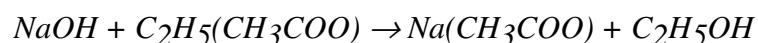
b) Calcular el tiempo necesario para que en un sistema cerrado (a volumen y temperatura constantes) la presión final que se alcance sea de 8 atm si se parte de una presión inicial de 5 atm, teniendo en cuenta que la presión parcial de inertes es de 1.5 atm.

3.- La reacción en fase gaseosa $2A \rightarrow R + 2S$ es de 2º orden con respecto a A. Cuando se introduce el componente A puro a 1 atm en un reactor discontinuo de volumen y temperatura constantes, la presión se eleva un 40% del valor inicial en 3 min. Para un reactor discontinuo a presión constante y a la misma temperatura, calcular:

a) Tiempo necesario para lograr la misma conversión.

b) Aumento de la fracción en volumen en ese tiempo.

4.- La reacción de saponificación:



es de segundo orden e irreversible a bajas concentraciones. En un reactor discontinuo a temperatura constante se carga una disolución acuosa que contiene NaOH y acetato de etilo, ambos con concentraciones 0.1 N. Después de 15 minutos, la conversión del acetato de etilo es del 18%. Calcular el tiempo de reacción necesario para convertir el 25% de NaOH cuando se carga el reactor con una disolución 0.2 N en NaOH y 0.1 N en acetato de etilo.

5.- La reacción exotérmica en fase líquida $A + 2B \rightarrow 3C$ se realiza en un reactor discontinuo. El alimento está constituido por 100 moles de A, 500 moles de B y 10 moles de inertes. La temperatura de la reacción se mantiene constante e igual a 200°C, para lo que se utiliza un intercambiador de calor por el que circula agua. El agua se introduce a 25°C y sale del circuito de refrigeración a 50°C. El área a través de la cual tiene lugar la transmisión de calor es de 2.5 m² y el coeficiente global de transmisión de calor es de 45 J/(s·m²·K). El calor de reacción a 25°C es de -10500 kcal/(kmol de C). Calcular el caudal de agua de refrigeración y el tiempo necesario para alcanzar un grado de conversión de A del 85%.

Datos:

$$C_{pA} = 75 \text{ kJ/(kmol} \cdot \text{K)}, C_{pB} = 95 \text{ kJ/(kmol} \cdot \text{K)},$$

$C_{pC} = 80 \text{ kJ}/(\text{kmol} \cdot \text{K})$, $C_{p\text{Inertes}} = 20 \text{ kJ}/(\text{kmol} \cdot \text{K})$,
(constantes en el intervalo de trabajo)

- 6.- La reacción endotérmica de tercer orden $3A \rightarrow 2B + C$ se lleva a cabo en un RDTA en fase líquida. La mezcla reaccionante se calienta primero hasta 400°C , y luego prosigue la reacción en forma adiabática. Durante el periodo inicial de calentamiento se produce una conversión de A del 10%. A partir de ese instante, ¿qué tiempo hará falta para alcanzar una conversión de A del 70% (con respecto al alimento inicial)?

Datos y aclaraciones:

$\Delta H = 25000 \text{ kcal}/(\text{kmol de A})$ (constante en el rango de temperaturas de trabajo)

$V = 1 \text{ m}^3$

$M = 950 \text{ kg}$

$N_{A0} = 10.2 \text{ kmol}$

$C_{p \text{ medio de mezcla}} = 0.59 \text{ kcal}/(\text{kg}_{\text{mezcla}} \cdot \text{K})$

$\ln k = -5000/T + 5$ (T en K, k en $(\text{m}^3/\text{kmol})^2/\text{h}$ referida a r, no a r_A)

Los valores inicial y final de conversión para los límites de integración serán 0.1 y 0.7, respectivamente

- 7.- En un reactor discontinuo de tanque agitado a escala de laboratorio, se desea llevar a cabo la reacción elemental en fase gaseosa $A + B \rightarrow 2C + D$. Para ello se introduce en el reactor una mezcla equimolar de los gases A y B junto con otras especies inertes. La cantidad de A que se introduce es de 4 moles y la cantidad total de mezcla alimentada al reactor es de 500 g. El peso molecular medio de la mezcla alimentada es de 40 g/mol. La temperatura inicial de los gases es de 200°C y la presión de 1 atm. Se trabaja a P constante y en condiciones adiabáticas. La reacción planteada es exotérmica y su entalpía de reacción a la temperatura de referencia de 20°C es $-12500 \text{ J}/(\text{mol de C})$. La expresión de la constante cinética de la reacción es: $\ln k = 8.2 - 1000/T$ (con T en K y k expresada en $\text{L}/(\text{mol} \cdot \text{h})$).

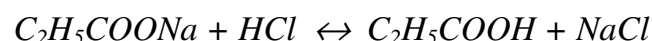
Calcular el tiempo de reacción necesario para alcanzar un grado de conversión del 90%.

Otros datos:

$C_{pA} = 10 \text{ J}/(\text{mol}_A \cdot \text{K})$, $C_{pB} = 15 \text{ J}/(\text{mol}_B \cdot \text{K})$, $C_{pC} = 15 \text{ J}/(\text{mol}_C \cdot \text{K})$, $C_{pD} = 12 \text{ J}/(\text{mol}_D \cdot \text{K})$,

$C_{p\text{Inertes}} = 20 \text{ J}/(\text{mol}_{\text{Inertes}} \cdot \text{K})$

- 8.- (examen jul'08) Para la producción de ácido propiónico se disuelve la sal de sodio en HCl según:



La reacción es reversible y de segundo orden global en ambos sentidos (de orden 1 para cada reactivo, tanto en la reacción directa como en la inversa). En el laboratorio se ensaya con un reactor discontinuo de tanque agitado a 50°C , valor que se mantiene constante. Se recogen muestras de 100 mL a diferentes tiempos. Para saber la concentración de HCl en cada muestra

se procede a neutralizar el HCl con NaOH 0.979 N. Las concentraciones iniciales de ácido y sal son iguales entre sí. Inicialmente no había nada de ácido propiónico ni de NaCl.

Datos del ensayo en el laboratorio (neutralizando 100 mL de muestra):

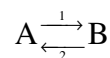
| t (min) | 0 | 8 | 16 | 23 | 30 | 39 | ∞ |
|------------------------|------|------|------|------|------|------|----------|
| V _{NaOH} (mL) | 52.5 | 32.1 | 23.5 | 18.9 | 16.7 | 14.4 | 10.5 |

- A partir de la tabla de resultados experimentales, determinar el valor de la conversión en el equilibrio y de las constantes cinéticas de las reacciones directa e inversa.
- ¿Cuánto tiempo tardará en alcanzarse una conversión del 75% en las condiciones de concentración inicial y temperatura anteriores?
- Esta reacción también se va a llevar a cabo a escala industrial en un reactor discontinuo de tanque agitado, partiendo de los moles de reactivos que producirían 453 kg de ácido propiónico con una conversión del 75%, con las concentraciones iniciales y la temperatura de los anteriores apartados. Sabiendo que en el proceso industrial existe un tiempo adicional de carga/calentamiento de 20 min y otro de descarga/enfriamiento de 10 min, ¿en qué momento se alcanzará la máxima producción (moles/min) de ácido propiónico? Suponiendo que el proceso se para en ese momento, ¿cuál será el tiempo total de producción en ese caso?

9.- La reacción de primer orden $A \rightarrow 2.5 B$ se lleva a cabo en un RDTA en fase gas a 2 atm y T constante con un 20% de inertes y el resto de A. En estas condiciones, el volumen aumenta un 60% en 20 min. En un reactor similar trabajando a volumen constante y la misma T:

- Calcular el tiempo requerido para alcanzar una presión de 8 atm si la presión inicial es de 5 atm, 2 de las cuales corresponden a inertes
- Calcular el valor del grado de conversión que dará la máxima producción por día si el tiempo de carga, descarga y limpieza del reactor es de 40 min

10.- La temperatura en un RDTA no debe ser superior a 500°C, teniendo lugar en él la reacción en fase líquida:



Si la composición del alimento es $C_{A0}=1 \text{ kmol/m}^3$ y $C_{B0}=0$, y si el grado de conversión de A que se desea alcanzar es del 80%, obtener:

- La temperatura constante a que debe realizarse el proceso para conseguir que el tiempo de reacción sea mínimo, y el valor de éste
- El perfil óptimo de temperaturas en función de la concentración de A (gráfica o tabla) para que el tiempo de reacción sea mínimo, y el valor de éste

Datos:

$$\begin{aligned} r_1 &= 1.785 \cdot 10^5 \cdot \exp(-12000/T) C_A \\ r_2 &= 1.172 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-24000/T) C_B \end{aligned} \quad \text{en kmol/(m}^3 \cdot \text{min)}$$

11.- Se desea realizar el proceso de fabricación de un producto B a partir de una materia prima A por ciclos de producción en un reactor discontinuo. Se ha estimado que el tiempo muerto debido a preparación, carga, descarga y limpieza de cada ciclo es de 0.5 h, correspondiendo un coste medio de 75 €/h.

Si la reacción $A \rightarrow B$ es de primer orden y transcurre en fase líquida a T constante, con constante de velocidad $k = 2 \text{ h}^{-1}$, el valor del reactante A es de 5 €/kmol, y el valor del producto B es de 105 €/kmol, calcular el tiempo de reacción para que el beneficio neto por unidad de tiempo sea máximo. El coste horario debido al proceso de reacción es de 5 €/h y el volumen del reactor es de 1 m^3 . La concentración inicial de A es 1 mol/L. Suponer que el reactivo A no reaccionado no se aprovecha.

12.- En un RDTA se desarrolla isotérmicamente la reacción reversible $A \leftrightarrow B$. La reacción tiene lugar a volumen constante y es de primer orden en ambas direcciones. En el inicio se dispone únicamente de reactivo A. Al trabajar a 373 K, se obtuvo la siguiente variación de la conversión (X_A) con el tiempo de reacción:

| t (min) | 42 | 90 | 115 | 145 | 173 | 205 | 280 | 482 |
|-------------------|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| X_A/X_{Aeq} (%) | 10 | 20 | 25 | 30 | 35 | 40 | 50 | 70 |

siendo X_{Aeq} la conversión de equilibrio. Si el tiempo de carga, descarga y limpieza del reactor es de 20 minutos, ¿qué valor de (X_A/X_{Aeq}) dará la máxima producción por día?