

Calculo de Reactores

Reacciones múltiples

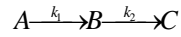
Objetivos del capitulo

- Tipos de reacciones múltiples
- Análisis (Reacciones en serie y en paralelo)
 - Maximizando la operación del reactor para un sistema con un solo reactivo
 - Maximizando la operación del reactor para un sistema con un dos reactivos
- Algoritmo para el diseño de reactores con reacciones complejas

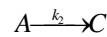
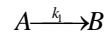
Reacciones múltiples

Tipos de reacciones múlt

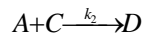
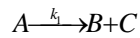
1. Reacciones en serie



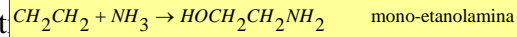
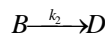
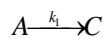
2. Reacciones en paralelo



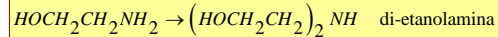
3. Reacciones complejas: Serie y paralelo



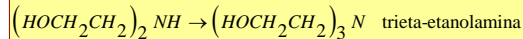
4. Independientes



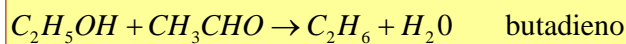
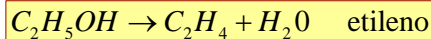
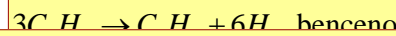
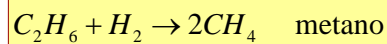
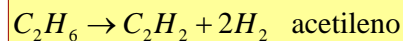
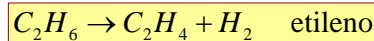
(lavado al seco, inhibidor de la corrosion)



(champús, limpiadores)



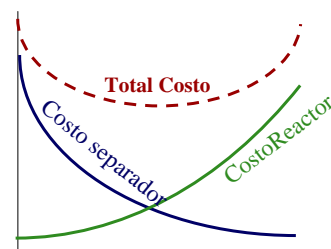
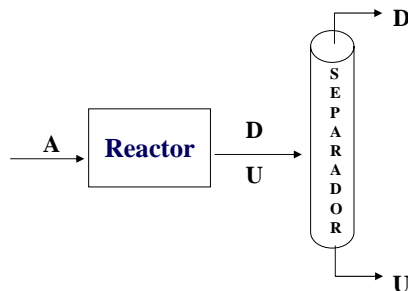
(cosméticos, detergentes domésticos, insecticida)



Selectividad y rendimiento

	<u>Instantánea</u>	<u>Global</u>
Reacción deseada: $A \xrightarrow{k_D} D$	selectividad $S_{DU} = \frac{r_D}{r_U}$	$\tilde{S}_{DU} = \frac{F_D}{F_U}$
Reacción indeseada: $A \xrightarrow{k_U} U$	rendimiento $Y_D = \frac{r_D}{-r_A}$	$\tilde{Y}_D = \frac{F_D}{F_{AO} - F_A} = \frac{N_D}{N_{AO} - N_A}$

- Cual debe ser el criterio para el diseño de un reactor ? **Económicas**
- Es necesario que el reactor opere de manera de minimizar la cantidad de producto no deseado? **NO**



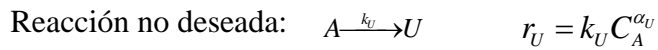
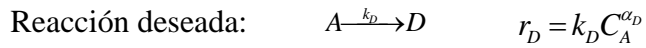
Selectividad y rendimiento

	<u>Instantáneo</u>	<u>Global</u>
Reacción deseada: $A \xrightarrow{k_D} D$	<i>selectividad</i> $S_{DU} = \frac{r_D}{r_U}$	$\tilde{S}_{DU} = \frac{F_D}{F_U}$
Reacción indeseada: $A \xrightarrow{k_U} U$	<i>rendimiento</i> $\phi = \frac{r_D}{-r_A}$	$\phi = \frac{F_D}{F_{AO} - F_A} = \frac{N_D}{N_{AO} - N_A}$
$\phi = \frac{r_D}{-r_A} = \frac{dC_D}{dC_A} \rightarrow dC_D = -dC_A \phi \rightarrow C_D = - \int_{C_{AO}}^{C_A} \phi dC_A$ <p style="text-align: right;"><i>Rendimiento instantáneo</i></p>		
$\phi = \frac{C_D}{C_{AO} - C_A} = \frac{1}{C_{AO} - C_A} \int_{C_{AO}}^{C_A} \phi dC_A$ <p style="text-align: right;"><i>Rendimiento global</i></p>		

*Maximizando la
selectividad para
reacciones paralelas*

Selectividad para un sistema de un reactivo

Ejemplo reacción en paralelo



Cual es la velocidad de desaparición de A ??

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D C_A^{\alpha_D}}{k_U C_A^{\alpha_U}} = \frac{k_D}{k_U} C_A^{(\alpha_D - \alpha_U)}$$

Selectividad para un sistema de un reactivo

Case 1: $\alpha_D - \alpha_U > 0$

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D}{k_U} C_A^{(\alpha_D - \alpha_U)} \quad \text{Alta } C_A \text{ favorece } D$$

Como se puede lograr esto?

- Para reacciones gaseosas, manteniendo altas presiones
- Para reacciones en fase liquida, manteniendo los diluyentes al mínimo
- Batch o reactores flujo pistón deben ser usados
- RAP no deben ser usados

Selectividad para un sistema de un reactivo

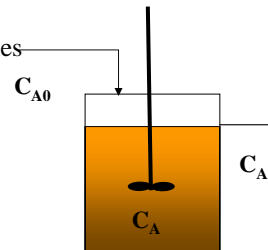
Case 2: $\alpha_D - \alpha_U < 0$

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D}{k_U C_A^{(\alpha_U - \alpha_D)}}$$

Bajas C_A favorecen D

Como se puede lograr esto?

- Para reacciones en fase gaseosa, operar a bajas presiones
- Para reacciones en fase líquida, diluir la alimentación
- Reactor RAP es preferido



Mantener las concentraciones de los reactantes a bajas

Selectividad para un sistema de un reactivo

Case 3: $\alpha_D - \alpha_U = 0$

Las concentraciones no pueden ser usadas como parámetro de operación para maximizar la selectividad

Que hacer?

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D}{k_U} = \frac{A_D \exp [-E_D / RT]}{A_U \exp [-E_U / RT]} = \frac{A_D}{A_U} \exp [-(E_D - E_U) / RT]$$

(a) If $E_D > E_U$

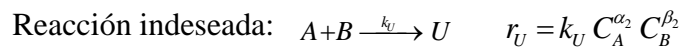
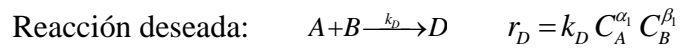
- Operar el reactor a temperaturas altas

(b) If $E_U > E_D$

- Operar reactor a bajas temperaturas

Selectividad para un sistema de dos reactivos

Ejemplo



$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D}{k_U} C_A^{(\alpha_1 - \alpha_2)} C_B^{(\beta_1 - \beta_2)}$$

Selectividad para un sistema de dos reactivos

Caso 1: $\alpha_1 > \alpha_2$; $\beta_1 > \beta_2$

Sea, $a = \alpha_1 - \alpha_2$; $b = \beta_1 - \beta_2$

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D}{k_U} C_A^a C_B^b$$

Para alta S_{DU} , mantener ambos A & B altos como sea posible

Como se logra esto?

- Use un reactor batch
- Use un reactor flujo pistón

Selectividad para un sistema de dos reactivos

Caso 2: $\alpha_1 > \alpha_2$; $\beta_1 < \beta_2$

Sea, $a = \alpha_1 - \alpha_2$; $b = \beta_2 - \beta_1$

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D}{k_U} \frac{C_A^a}{C_B^b}$$

Para alta S_{DU} , mantener la concentración de A alta y la de B baja

Como se logra esto?

- Use un reactor semi-batch donde B es alimentado lentamente
- Use un reactor pistón con la corriente B alimentada continuamente
- Use una serie de reactores RAP con A alimentado en el primero
B en cada reactor

Selectividad para un sistema de dos reactivos

Caso 3: $\alpha_1 < \alpha_2$; $\beta_1 < \beta_2$

Sea, $a = \alpha_2 - \alpha_1$; $b = \beta_2 - \beta_1$

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D}{k_U} \frac{C_A^a C_B^b}{C_A^a C_B^b}$$

Para altas S_{DU} , mantener ambas concentraciones de A y B bajas

Como se puede lograr esto?

- Use RAP
- Use reactor tubular con reciclo
- Use alimentación diluida

Selectividad para un sistema de dos reactivos

Caso 4: $\alpha_1 < \alpha_2$; $\beta_1 > \beta_2$

Sea, $a = \alpha_2 - \alpha_1$; $b = \beta_1 - \beta_2$

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_D}{k_U} \frac{C_B^b}{C_A^a}$$

Para altas S_{DU} , mantener la concentración de B alta y de A baja

Como se logra esto?

- Use un reactor semi-batch donde A es alimentado lentamente
- Use un reactor pistón con la corriente A alimentada continuamente
- Use una serie de reactores RAP con B alimentado en el primero
A en cada reactor