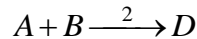
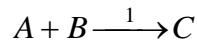


INGENIERIA de la REACCION QUIMICA. HOJA 4. REACCIONES MULTIPLES

1.- Al reaccionar dos compuestos, A y B, se obtienen C y D según:

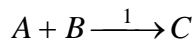


Utilizando $C_{A0} = C_{B0}$, se obtienen los siguientes datos:

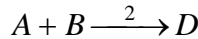
t(h)	0	4,5	6	9	10,5	24	27,5	30
C_A (mol/l)	0,181	0,141	0,131	0,119	0,111	0,069	0,064	0,060

Además se observó que $C_C/C_D = 16 =$ constante a lo largo del tiempo. Determinar las ecuaciones cinéticas de ambas reacciones.

2.- Un mol de A y otro de B reaccionan para dar los meta y orto derivados (C y D respectivamente).

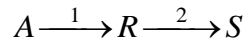


En un experimento realizado en discontinuo, partiendo de 1 mol/L de A y 3



moles/L de B, y a una temperatura 70°C, se ha obtenido que la mitad de A desaparece en 20 minutos siendo la relación de isómeros meta y orto del 93% y 7%, respectivamente. Cuando la temperatura aumenta 10°C la concentración de A es la mitad de la inicial a los 10 minutos y la proporción de los isómeros meta y orto a ese tiempo es 60 y 40%, respectivamente. Suponiendo que ambas reacciones siguen una cinética de primer orden en A y B, determinar las constantes de velocidad a las temperaturas indicadas y analizar la influencia de esta variable en la selectividad.

3.- Dado el siguiente esquema de reacciones de primer orden:



a) Deducir una expresión para la C_{Rmax} obtenible y el tiempo a que se obtiene, en función de k_1 y k_2

b) En el caso en que:

$$k_1 = 25 \cdot 10^6 \exp(-10.000/T) \text{ (h}^{-1}\text{)}$$

$$k_2 = 20 \cdot 10^6 \exp(-8.000/T) \text{ (h}^{-1}\text{)}$$

La reacción se produce en fase gaseosa, alimentando A puro, a 600 K y 10 atm. ¿Cuánto vale C_{Rmax} y t_{max} ?

c) ¿Se puede obtener una C_R mayor?

4.- Dado el siguiente esquema de reacción: $A \xrightarrow{1} R \xrightarrow{2} S$

donde: $k_1 = k_2 = 0,021 \text{ min}^{-1}$, siendo: $C_{A0} = 2 \text{ mol/l}$; $C_{R0} = C_{S0} = 0$.

Calcular el tiempo para el cual la concentración de R es máxima, ¿Cuál es el valor de esta concentración máxima?

5.- Para la reacción: $A \xrightarrow{1} R \xrightarrow{2} S$, se han obtenido los siguientes datos:

t	0	0,5	1	1,5	2	2,23	2,5	3
C_A	1	0,60	0,37	0,22	0,14	0,107	0,08	0,05
C_R	0	0,38	0,58	0,68	0,71	0,715	0,71	0,69
C_S	0	0,02	0,05	0,10	0,15	0,178	0,21	0,26

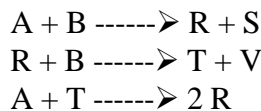
Calcular k_1 y k_2 . Ambas reacciones son de primer orden. Las unidades de t son arbitrarias, las C son fracciones molares.

6.- Para las dos reacciones reversibles en serie llevadas a cabo en un reactor discontinuo:
 $A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons C$ se han determinado las constantes cinéticas directas y las constantes de equilibrio: $k_1=0,001 \text{ min}^{-1}$ $k_2=0,01 \text{ min}^{-1}$ $K_{e1}=0,8$ y $K_{e2}=0,6$

Si se emplea una concentración de A inicial de 1 mol/L, determinar:

- Los perfiles de concentración de los tres componentes.
- A qué tiempo se alcanza el 90% de la conversión de equilibrio de A y cual es la composición de la mezcla en ese tiempo.

7.- Al poner en contacto A y B, a una cierta temperatura y en presencia de un catalizador, se producen las siguientes reacciones:



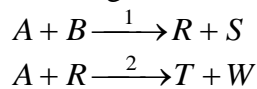
Al inicio de la reacción hay n_{A0} y n_{B0} moles de A y B, y el resto de especies no están presentes, $n_{j0} = 0$.

Al cabo de un cierto tiempo de reacción, se analiza la mezcla, y se determina que hay n_B, n_R y n_V moles de esos tres compuestos (B, R y V).

- ¿Se puede conocer la composición de toda la mezcla?
- Dedúzcanse ecuaciones que proporcionen el número de moles de las restantes especies (A, S y T) después de ese tiempo de reacción.
- Aplicar dichas ecuaciones al caso en que:

$$\begin{aligned} t = 0 : n_{A0} &= 2 ; n_{B0} = 3 \\ t = t : n_B &= 1 ; n_R = 1,5 ; n_V = 0,5 \end{aligned}$$

8.- Al estudiar la siguiente reacción múltiple:



en fase líquida, de forma isoterma, se han encontrado los datos de la tabla. Comprobar si las ecuaciones cinéticas de las dos reacciones pueden ser las siguientes:

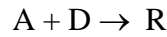
$$r_1 = k_1 C_A C_B$$

$$r_2 = k_2 C_A C_R$$

Calcular el valor de k_1 y k_2 , si $C_{B0} = 100 \text{ mol/l}$ (aproximadamente constante).

C_A (mol/l)	C_R (mol/l)	R_A (mol/l.min)	R_R (mol/l.min)
3	1	-2,2	0,75
2,5	0,9	-1,8	0,66
1,5	0,6	-0,95	0,50
1	0,4	-0,60	0,42
0,6	0,3	-0,30	0,25

9.- Cantidades equimoleculares de A, B y D entran como alimentación a un reactor de mezcla completa, donde se combinan de acuerdo con las reacciones elementales:



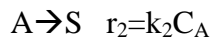
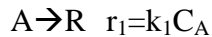
siendo, a una temperatura determinada, $k_2/k_1 = 0,2$

- Calcúlese la composición de la mezcla cuando se ha consumido el 50% de A.
- Repetir el cálculo si lo consumido es el 50% de D.

10.- Las reacciones elementales $A+B \rightarrow 2C$ y $A+C \rightarrow D$ se llevan a cabo simultáneamente en un reactor tubular adiabático a 5 atm. La temperatura a la entrada son 350 K. ¿Qué volumen de reactor es necesario para obtener una producción de D de 0,2 mol/s? Determinar los perfiles de reactivos, productos y temperatura a lo largo del reactor.

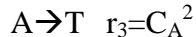
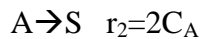
Datos: $F_{A0}=0,9$ mol/s , $F_{B0}=0,3$ mol/s, $F_{C0}=0$ mol/s, $F_{D0}=0$ mol/s
 $(-\Delta H_R)_1=3000$ cal/mol , $(-\Delta H_R)_2=1500$ cal/mol $C_{PA}= C_{PB} =15$ cal/mol K
 $C_{PC}= 10$ cal/mol K $C_{PD} =25$ cal/mol K
 $k_1=\exp(1,915-1091,7/T)$ L/s mol $k_2=\exp(1,222-1091,7/T)$ L/s mol

11.- Las reacciones de descomposición de A en fase líquida, de primer orden, se llevan a cabo en una batería de dos tanques en serie, el primero de ellos con un tiempo de residencia de 2.5 minutos y el segundo de 5 minutos.



Cuando se alimenta al primer reactor una disolución que sólo contiene A (1 mol/L), las concentraciones a la salida del primer reactor de A y R son iguales (0,4 mol/L). ¿Cuál es la concentración de cada especie a la salida del segundo reactor?

12.- 2.- Considere la descomposición en paralelo de A:



- ¿Cuál es el rendimiento diferencial a R en función de la concentración de A?
- Si $C_{A0} = 2$ mol/L, ¿Cuál es la máxima concentración de R que puede obtenerse en un reactor CSTR?
- Si $C_{A0} = 2$ mol/L, ¿Cuál es la máxima concentración de R que puede obtenerse en un reactor tubular con flujo pistón?