

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

ANTEPROYECTO PARA LA INSTALACION DE UN REACTOR CATALITICO
EXPERIMENTAL EN EL LABORATORIO DE INGENIERIA DE LA FACULTAD
DE QUIMICA.



T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
I N G E N I E R O Q U I M I C O

PRESENTA:

JUSTINO FERNANDEZ DE TERESA.

1 9 7 9



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

TESIS 1979
AÑO M.T. 115
FECHA
PAGOS



JURADO ASIGNADO

PRESIDENTE	PROF.	:PASCUAL LARRAZA SMITH
VOCAL	"	:LEOPOLDO RODRIGUEZ SANCHEZ
SECRETARIO	"	:CARLOS BAZAN VILLEGAS
1er SUPLENTE	"	:ROLANDO BARRON RUIZ
2do SUPLENTE	"	:CARMEN ROSAS PRECIADO

Sitio donde se desarrolló el tema:

Monsanto Mexicana, S. A. Medellín no 79 y Facultad de Química...
1967 y 1968.

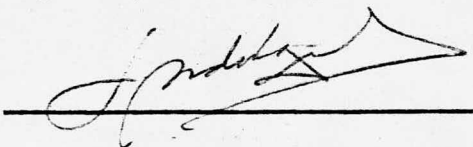
Nombre completo y firma del sustentante.

Justino Fernández de Teresa.



Nombre completo y firma del asesor del tema

Ing. Leopoldo Rodríguez Sánchez.



S U M A R I O

Capitulo		Pagina
I	Introducción.	1
II	Selección de la Reacción	2
III	Reacción.	3
IV	Selección del Proceso	5
V	Selección del Catalizador	12
VI	Evaluación y Diseño de la Instalación	13
VII	Seguridad	29
VIII	Conclusiones	35
IX	Bibliografía	36
X	Apéndice	38

Apéndice.

1	Estimación de Constantes involucradas en el Cálculo de la Corriente de alimentación de nitrobenceno	38
2	Estimación de Constantes y propiedades involucradas en el Cálculo del Calor de Reacción	47
3	Estimación de Constantes y Propiedades involucradas en el Cálculo del Calor Retirado	55
4	Diseño del Equipo Auxiliar del reactor	73
5	Datos Alimentados a la Computadora	86

I.- INTRODUCCION.-

Este trabajo tiene por objeto proporcionar un estudio completo a la dirección de esta Facultad para la futura realización del proyecto mencionado.

La instalación de este reactor, será llevada a cabo con el objeto básico de dotar al Laboratorio de Ingeniería Química de un equipo que permita posteriormente la realización de prácticas de los créditos de Ingeniería Química VII y VIII.

El proyecto formará parte de la Tesis Profesional del sustentante Justino Fernández de Teresa, para optar por el Título de Ingeniero Químico, asesorado por el Sr. Ing. Quim. Leopoldo Rodríguez Sánchez profesor de las materias que se han citado en esta misma facultad. Dicha instalación permitirá también la obtención de otras valiosas Tesis Profesionales que podrán contribuir en buena parte al prestigio de la Institución.

La elaboración de este trabajo, se pensó y se decidió llevar a cabo, en vista que la enseñanza de las materias cinéticas en la Carrera de Ingeniero Químico, carecen por completo de entrenamiento práctico y en la actualidad únicamente se imparten como cursos teóricos, siendo indispensable una exposición completa de los créditos referidos, haciendo debida alusión tanto a la teoría como a la práctica.

II.- SELECCION DE LA REACCION.-

Primeramente se pensó en la obtención de acrílo nitrilo, pero se tuvo que deshechar esta posibilidad debido a las serias dificultades que presenta su elaboración, ya que una de las materias primas es ácido cianhídrico, y éste, debido a su gran toxicidad, representa un peligro inminente en el manejo de una instalación para este proceso y exigiría unas condiciones de seguridad tan estrictas, que son imposibles de obtenerse en el Laboratorio de Ingeniería Química.

En segundo término, se estudió la reacción de oxidación del ácido orto toluídico por medio de dicromato de potasio para obtener ácido ftálico; ésta es una reacción no catalítica, pero para efectuarla, se requieren unas condiciones de operación tan drásticas, que también son imposibles de obtenerse en el citado Laboratorio.

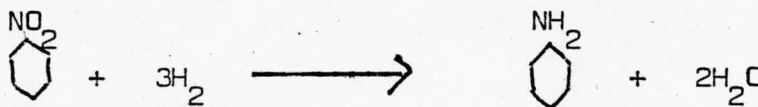
Finalmente, después de un profundo análisis de la información disponible, se llegó a la conclusión de que la reacción de reducción de nitrobenceno para producir anilina, ameritaba un estudio para llevarla a la práctica en un reactor tubular catalítico. Una vez concluido el análisis preliminar de la bibliografía disponible, se ideó un proceso para realizar esta alternativa; a continuación en el capítulo siguiente, se da una tabla con los diferentes métodos y catalizadores empleados, así como las condiciones de operación y las referencias de donde han sido tomados los datos.

III.- REACCION.-

a).- Descripción de los datos disponibles.- Como resultado del estudio bibliográfico que se realizó en diferentes bibliotecas de México, se obtuvo una buena parte de la información existente sobre la reacción que se va a tratar.

Los datos disponibles se refieren tanto a diseño como al aspecto cinético y catalítico, siendo los últimos los que más interesan, ya que al carecer de este tipo de información, sería necesario efectuar las determinaciones de laboratorio para establecer la cinética de la reacción.

b).- Materias Primas.- Las materias primas que se emplean en el proceso de obtención de anilina, son nitrobenzeno e hidrógeno, los cuales van a ser conducidos a un reactor con lecho catalítico fijo en donde se va a efectuar la reducción del primero, y se supone que se lleva a cabo la siguiente reacción:



El catalizador empleado también se puede considerar materia prima, aunque éste puede ser regenerado; sobre los componentes y constitución de este último, se hablará más adelante en el capítulo correspondiente.

Tabla III - 1

Ref.	Catalizador empleado	Cond. de reac.			Conclusiones de la refe- rencia.
		T °C	H/Nb adim.	% adim.	
(4B)	Cu y Ni	302	5	96	$r = k(P_{Nb} P_H)^{\frac{1}{2}}$
	Cu y Cr	302	5	89	$k = 4.104 \cdot 10^4 e^{\left(\frac{-8240}{T}\right)}$
(5B)	Cu impreg- nado con gel de Si	209	15	62	
	CuO soporta- do en gel de Si por copre- cipitación.	209	12	72	$r = 0.475(P_{Nb} P_H)^{\frac{1}{2}}$
	CuO impregna- do con Al ₂ O ₃	209	12	53	

IV.- SELECCION DEL PROCESO.-

a).- Descripción del proceso de aminación por reducción.- Las aminas son compuestos derivados del amoníaco, por la sustitución de uno o más átomos de hidrógeno por un radical arilo, alquilo o aralkilo o un grupo heterocíclico. Muchos procesos pueden ser empleados para la preparación de las aminas, pero en general pueden ser clasificados en dos grandes grupos: aminación por reducción y aminación por amniolisis; en la aminación por reducción en contraste con la aminación por amniolisis, nada más existe una ligadura entre carbón y nitrógeno en la molécula. Por medio de hidrógeno, fierro u otros agentes de reducción, los siguientes compuestos pueden ser transformados a aminas; nitrocompuestos: productos intermedios de reducción de nitrocompuestos, como nitroso, hidrazo, y azo compuestos, oximas, amidas, y nitrilos.

Las aminas son usadas en la producción de colorantes, medicinas, detergentes, plásticos, fibras, emulsificadores, antioxidantes, y humos químicos.

Algunos de los procesos de aminación por reducción que más son usados en la práctica, emplean los siguientes reactivos:

- 1.- Hidrógeno o monóxido de carbono en presencia de catalizador en fase líquida o de vapor.
- 2.- Fierro o zinc en solución ácida o de vapor.
- 3.- Fierro o zinc en solución alcalina
- 4.- Sulfuros en solución alcalina.
- 5.- Diversos agentes de reducción.

- a).- Hidrosulfito o hiposulfito de sodio en solución alcalina
- b).- Sulfito de sodio en solución
- c).- Acción electrolítica
- d).- Hidruros metálicos

Para seleccionar debidamente los agentes de reducción, ésta debe ser parada en las etapas intermedias, y valorar los productos de reducción que pueden ser obtenidos, para así poder establecer las necesidades y rendimientos de los resultados requeridos.

De los procesos enumerados anteriormente, el primero es el que se va a describir unicamente en el presente trabajo, ya que además de lograrse los mejores rendimientos, el producto obtenido es bastante puro y no tiene contaminaciones de fierro, sulfuros, etc.

Reducción Catalítica de Nitrobenceno en Fase Vapor.-

La anilina puede ser manufacturada por hidrogenación de nitrobenceno en fase vapor, usando catalizador de cobre.

El nitrobenceno va a vaporizarse en una corriente de hidrógeno y a ser pasado a través de un reactor continuo que contiene óxido de cobre como catalizador, los gases entran al reactor a 400 °F y lo abandonan sobre 450-500 °F por el carácter exotérmico de la reacción. Hidrógeno fresco es agregado a la corriente primaria que entra al reactor, la relación molar de hidrógeno a nitrobenceno debe ser alrededor de 5. Después de que los gases salen del reactor, deben pasarse a través de un enfriador para que se condensen el agua y anilina formadas, así como el nitrobenceno que no reaccionó, el hidrógeno debe ser extraído y puede recircularse o bien emplearlo en otra cosa o deshecharlo. La anilina producida se lleva a un separador para extraerle el agua, y después a una columna de rectificación para quitarle el nitrobenceno, se puede lograr un rendimiento de 98%, por medio de este proceso.

b).- Descripción de los diferentes tipos de proceso.-

1.- Proceso experimental propuesto por D.N. Rihani, y T.K. Narayan con L.K. Doraiswamy (4B)

Consiste en un arreglo de vidrio de tipo experimental que usa como medio de calentamiento para llegar a la temperatura de activación de la reacción, un baño a base de un lecho fluido de sólidos fundidos, el cual a su vez sirve como medio de enfriamiento cuando empieza el desprendimiento de calor que tiene lugar al iniciarse la reacción. El uso de este medio de transmisión de calor permite dentro de ciertos límites considerar el proceso isotérmico, ya que el calor producido no es suficiente para alterar la temperatura del medio. La principal desventaja que se tiene es que el manejo de sólidos fundidos es muy delicado y requiere un equipo especial ya que en ciertos casos puede emitir vapores tóxicos. Como ventaja se puede considerar su fácil construcción ya que en la actualidad se puede efectuar fácilmente el trabajo de soplado de vidrio a un costo no muy elevado.

2.- Proceso experimental propuesto por K.H. Gharda y C.M. Sliepcevich.(5B)

El equipo y el material son similares al anteriormente descrito. El hidrógeno se alimenta de cilindros comerciales y el nitrobenzeno es empujado por la presión que resulta al inyectar aire y además se tiene un medidor capilar de flujo para poder establecer un control del mismo. El reactor consiste en un tubo de vidrio envuelto en una resistencia eléctrica que sirve como medio de calentamiento, todo este conjunto se encuentra cubierto de una chaqueta de vidrio conectada a una bomba de vacío para tener circulación de aire y evitar medidas erróneas.

Este proceso difiere del anterior, en que la reducción catalítica del nitrobenzeno se lleva a cabo sobre un lecho fluidizado.

Existen varios procesos similares por este mismo método, pero el objeto de esta Tesis, es un estudio de la reacción catalítica del nitrobenzeno sobre lecho fijo, por lo tanto este tipo de procesos y todos los basados en el mismo principio, quedan deshechados.

3.- Aparato propuesto por O.W. Brown y C.O. Henke.- (1C)

El hidrógeno alimentado proviene de una fuente electrolítica, el cual puede ser controlado por la corriente administrada. El nitrobenzeno es introducido por medio de una pipeta calibrada, la que va conectada a un tubo de vidrio de 7 o de 10 mm. de diámetro con un tubo capilar sellado.

El reactor consiste en un tubo de acero comercial de 1/2" de diámetro, de 33" de largo, el cual se encuentra conectado a un condensador.

Como elemento de calentamiento tiene un tubo de acero comercial de 2" de diámetro de 29" de longitud, en el cual se introduce el tubo de 1/2"; el tubo de 2" va cubierto con una capa de papel de asbesto impregnado con una solución de silicato de sodio, cubierto con una capa de cemento de alundum; alrededor de 35 pies de alambre cromel de calibre 16, van enrollados en el conjunto para formar una resistencia eléctrica que va a servir como medio de calentamiento. Esta resistencia se encuentra debidamente aislada, tanto eléctrica como térmicamente.

La principal desventaja de este proceso, consiste en que la construcción del medio de calentamiento, hace sumamente difícil intercalar un medio de enfriamiento, para una vez que la reacción se haya activado poder retirar sin gran dificultad, el calor de reacción generado.

4.- Proceso industrial propuesto por Faith, Keyes, y Clark.

(1A).

Se basa en el mismo principio que los anteriores, con algunas pequeñas variaciones, como recirculaciones de reactivos, instrumentación y control automático; en fin, todo lo necesario para llevar a cabo un régimen continuo y permanente.

Para efectuar la reacción catalítica en escala industrial, las instalaciones son más complejas y se construyen con materiales comerciales; los reactores comerciales se emplean con más frecuencia que los diseñados para un caso específico.

5.- Análisis de los métodos propuestos, y selección del proceso a seguir.-

Como puede verse entre los procesos de reducción de nitrobenzeno anteriormente descritos, se pueden formar dos grupos:

Los que usan lecho fluidizado y los que usan lecho catalítico fijo.

Respecto a los primeros, se han desarrollado procesos industriales bastante complejos empleando tecnologías modernas, y se han difundido ampliamente en el medio industrial en todo el mundo. De los segundos no se dispone de la información necesaria, ni de una tecnología para llevarlos a la práctica.

Es el objeto principal de esta Tesis, el tratar de obtener, si no una tecnología completa, si los principios básicos para que estudios posteriores puedan complementar este trabajo, y establecer, si es posible (siempre y cuando los resultados que se obtengan de esta investigación sean favorables), un método para la fabricación de anilina por este proceso.

6.-Proceso experimental para el Laboratorio de Ingeniería Química propuesto por el sustentante.-

Debido a las restricciones que se presentan en el Laboratorio mencionado, y tomando en consideración que las medidas de seguridad que se deben tener para el manejo de un equipo para efec-

tuar esta reacción deben ser extremas, se propone un proceso continuo, en el cual el contacto de los fluidos con las partículas sólidas de catalizador, tiene lugar en un reactor tubular con lecho fijo.

La mayoría de los procesos que se han desarrollado, pretenden ajustarse hacia un sistema isotérmico, lo cual se logra retirando la debida cantidad de calor de reacción para que se pueda mantener la temperatura constante. En este caso se va a dejar que la temperatura se incremente hasta un límite, el cual será establecido por el cálculo. Esta suposición se basa en las observaciones experimentales efectuadas por los autores Brown y Henke (ref 1C), los cuales investigaron el comportamiento de esta reacción con diferentes catalizadores de cobre y níquel, y en ambos casos, los resultados que obtuvieron presentan un favorable aumento en la conversión al ser incrementada la temperatura del catalizador. Es por las consideraciones anteriores, por lo que se va a tratar de establecer un sistema en el cual, la temperatura no se mantiene constante, y de esta manera, tratar de obtener prácticamente resultados favorables mediante un equipo de fácil manejo y construcción.

El equipo consiste en lo siguiente:

El reactor está formado por un tubo de acero inoxidable de dos pulgadas de diámetro y dos metros de longitud, en el cual se acondicionará el lecho catalítico.

El medio de calentamiento será una resistencia eléctrica enrollada en un tubo de vidrio o de cerámica de 1/2" de diámetro, la cual será introducida en el centro del tubo y servirá tanto para el precalentamiento de los reactivos, como para elevar la temperatura del lecho catalítico. Esta resistencia estará divi-

dida en dos porciones, la primera sirve para evaporar el nitro-
benceno y calentar el hidrógeno hasta la temperatura de arranque.
(es importante evitar la presencia de aire para que no haya com-
bustión del hidrógeno y peligro de explosión). La segunda resistencia
servirá para llevar al lecho catalítico a la temperatura de inicio
de la reacción. La alimentación de hidrógeno proviene de un tambor
comercial y se une a la alimentación de nitrobenzénico el cual viene
de un tanque de almacenamiento impulsado por una bomba y llegará a
un tanque amortiguador para que se iguale su presión con la del
hidrógeno, y de este tanque, la mezcla de Nb y H₂ serán inyectados
al reactor por medio de válvulas independientes a los tubos de
alimentación, aprovechando la energía de presión que tiene el cilin-
dro de H₂.

El sistema de enfriamiento del reactor, será una chaqueta de tubo de
fierro comercial de 6 pulgadas de diametro en la que se introducirá
el medio de enfriamiento, que podrán ser vapores saturados o bien
liquidos con un punto de ebullición conocido, para que no presente ma-
yores dificultades de control, aun cuando sea necesario usar diferen-
tes temperaturas de enfriamiento en la misma reacción.

Los productos resultantes de la reacción se llevan a un condensador
y a una torre de separación para separarlos por destilación.

El condensador y la torre de separación podrían ser los que se usan
para las practicas de esas materias, unicamente será necesario hacer
las conecciones y adaptaciones pertinentes, es por eso que no se hi-
cieron los calculos ni el diseño de los dos equipos; ya que el cálcu-
lo es complicado y no ilustra en nada el objeto que se persigue en
este trabajo, el cual es primordialmente cinético.

V.- SELECCION DEL CATALIZADOR.-

a).- En la Tabla III - 1, se anota que el catalizador Cu-Ni tiene el mejor rendimiento, y como esta tabla fué formada por simple análisis de los experimentos efectuados por los autores de las referencias mencionadas en la misma; se seguirá el mismo criterio de ellos, pues se trata de aprovechar al máximo los datos disponibles para la mayor simplificación de los cálculos. Por lo antes mencionado, el catalizador escogido será aquél que tenga mayores probabilidades de dar un máximo rendimiento y el Cu-Ni es el que experimentalmente dió mejores resultados.

b).- Preparación.-

El lecho inerte formado por asbesto puro es sumergido en una solución de nitratos de Cu y de Ni en la proporción deseada y se agita vigorosamente. A ésta se agrega despacio y con rápida agitación también, una solución de NaOH poco más alcalina que la fenolftaleína, se deja reposar una noche y se filtra. Después el precipitado se lava hasta quitarle alcalinidad y se seca a 80 °C y una vez seco se calcina en una mufla a 425 °C. La mezcla de óxidos resultantes será reducida al estado metálico dentro del reactor por medio de una corriente de hidrógeno antes de la reacción, a una temperatura de 325 °C.

La relación de metales debe ser 1 ; 1 y la concentración del catalizador 15 a 20 %, ya que mayor concentración no afecta los resultados. El uso de Cr como promotor no tiene importancia ya que el incremento en el rendimiento sólo puede interesar en escala industrial.

VI.- EVALUACION Y DISEÑO DE LA INSTALACION.-

1.- Bases y suposiciones de cálculo.-

a).- Consideraciones termodinámicas.-

1.- Las propiedades termodinámicas de anilina y nitrobenzeno fueron determinadas por contribución de grupos y tomadas de referencias de información las cuales se indican en el apéndice en el párrafo correspondiente.

2.- La ecuación de calor de reacción liberado, se desarrolló por medio de la ecuación de Kirchhoff, pero la que se utilizó fué la reportada en la referencia (4B).

b).- Consideraciones cinéticas.-

1.- Sistema reaccionante heterogéneo: sólido - gas. Se trata de una reacción catalítica en fase gaseosa con catalizador sólido. Según la referencia (5B) el paso que controla el mecanismo de ésta, es la reacción sobre la superficie; Entre nitrobenzeno absorbido molecularmente e hidrógeno que se adsorbe en dos centros activos disociándose.

Para efectos del diseño se supone que se dispondrá de un catalizador de factor de efectividad, $E = 1.0$

2.- Transferencia de masa.- Por análisis de las experiencias reportadas en la mencionada referencia (4B), a partir de una velocidad de 3 ft/min., el efecto de transferencia de masa se considera nulo. Al efectuar las primeras estimaciones se escogió la velocidad de alimentación en 25 ft/min. que es la que proporcionó mejores resultados.

3.- Modelo cinético.- Las ecuaciones empíricas de la velocidad de reacción y de la constante cinética de velocidad de reacción según las referencias (4B) y (5B) son:

$$r = k \sqrt{P_{Nb} P_H}$$

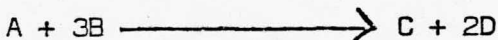
$$k = 4.104 \times 10^4 e^{-\frac{8240}{T}}$$

El modelo cinético empírico corresponde al mecanismo mencionado en el punto B-1, pero no aparece ningún término de adsorción ya que probablemente se adsorben dentro de la constante empírica por ajustarse en forma específica al fenómeno y aproximarse satisfactoriamente al modelo teórico.

2.- Cálculo y Diseño de la instalación.-

a).- Estudio cinético.-

Sea la reacción:



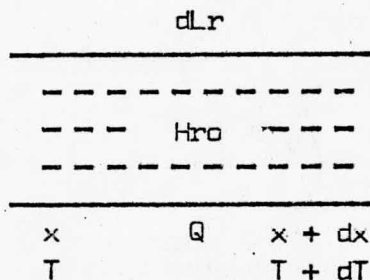
Donde:

A = Nitrobenzeno

B = Hidrógeno

C = Anilina

D = Agua



Balance de Material:

$$x = \frac{\text{Moles de C prod.}}{\text{Moles de A alim.}}$$

$$F = \text{Moles de A alimentados}$$

$$n_A = F(n_{Ao} - x) \qquad n_{Ao} = \frac{\text{Moles de A alim.}}{\text{Moles de A alim.}} = 1$$

$$n_B = F(n_{Bo} - 3x) \qquad n_{Bo} = \frac{\text{Moles de B alim.}}{\text{Moles de A alim.}} = 5$$

$$n_C = F(n_{Co} + x) \qquad n_{Co} = \frac{\text{Moles de C alim.}}{\text{Moles de A alim.}} = 0$$

$$n_D = F(n_{Do} + 2x) \qquad n_{Do} = \frac{\text{Moles de D alim.}}{\text{Moles de A alim.}} = 0$$

$$n_A = 1 - x$$

$$n_B = 5 - 3x$$

$$n_C = x$$

$$n_D = 2x$$

$$n_T = 6 - x$$

La velocidad de reacción está expresada por:

$$r = K P_A^{1/2} P_B^{1/2} \qquad (1)$$

La ecuación de diseño:

$$\frac{W}{F} = \int_0^x \frac{1}{r} dx \qquad (2)$$

Base 1 Mol nb Alim.

$$P_A = N_A \pi = \frac{n_A \pi}{nt} = \frac{1-x}{6-x} \pi \quad (3)$$

$$P_B = N_B \pi = \frac{n_B \pi}{nt} = \frac{5-3x}{6-x} \pi \quad (4)$$

Sustituyendo (3) y (4) en (1) :

$$r = \left[K \left(\frac{1-x}{6-x} \pi \right)^{\frac{1}{2}} \right] \left[\left(\frac{5-3x}{6-x} \pi \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (5)$$

$$r = \frac{dx}{d(W/F)}$$

En donde:

$$K = 4.104 \cdot 10^4 e^{\frac{-8240}{T}} \quad (6)$$

Sustituyendo (5) y (6) en (2) y arreglando:

$$\frac{dx}{d(W/F)} = \frac{K(1-x)^{\frac{1}{2}} (5-3x)^{\frac{1}{2}} \pi}{6-x}$$

$$\frac{dx}{dW} = \frac{K(1-x)^{\frac{1}{2}} (5-3x)^{\frac{1}{2}} \pi}{F(6-x)}$$

$$dLr = \frac{dW}{A_1} \cdot \frac{1}{S}$$

$$dW = dLr \cdot A_1 \cdot S$$

Sustituyendo en (7):

$$\frac{dx}{dLr} = \frac{\rho A l}{F} SK \frac{(1-x)^{1/2} (5-3x)^{1/2}}{6-x} \pi$$

b).- Balance de energía-

$$\begin{aligned} & \left[F(n_{A0} - x)Cp_A + F(n_{B0} - 3x)Cp_B + FxCp_C + 2FxCp_D \right] (T - T_0) + F(-\Delta H_{rc}) dx \\ & = \left[F(n_{A0} - x)Cp_A + F(n_{B0} - 3x)Cp_B + FxCp_C + 2FxCp_D \right] (T - T_0) \\ & + \left[F(-dx)Cp_A + F(-3dx)Cp_B + FdxCp_C + 2FdxCp_D \right] (T - T_0) \\ & + \left[F(n_{Ac} - x)Cp_A + F(n_{B0} - x)Cp_B + FxCp_C + 2FxCp_D \right] dT \\ & + \left[F(-dx)Cp_A + F(-dx)Cp_B + FdxCp_C + 2FdxCp_D \right] dT + dq \end{aligned} \quad (1)$$

De donde:

$$\begin{aligned} F(-\Delta H_{rc}) dx & = \left[F(-dx)Cp_A + F(-3dx)Cp_B + FdxCp_C + 2FdxCp_D \right] (T - T_0) \\ & + dq + \left[F(n_{A0} - x)Cp_A + F(n_{B0} - 3x)Cp_B + FxCp_C + 2FxCp_D \right] dT \end{aligned} \quad (2)$$

Dividiendo la e presión entre dLr:

$$\begin{aligned} (-\Delta H_{rc}) \frac{dx}{dLr} F - \frac{dq}{dLr} & = \left[F \left(-\frac{dx}{dLr} \right) Cp_A + 3F \left(-\frac{dx}{dLr} \right) Cp_B + F \frac{dx}{dLr} Cp_D \right] (T - T_0) \\ & + \left[F(n_{A0} - x)Cp_A + F(n_{B0} - 3x)Cp_B + FxCp_C + 2FxCp_D \right] \frac{dT}{dLr} \end{aligned}$$

Arreglando:

$$\frac{dT}{dLr} = \frac{F(-\Delta H_{ro}) \frac{dx}{dLr} - \frac{dq}{dLr} - \left[F \left(-\frac{dx}{dLr} \right) C_{pA} + F \left(-\frac{dx}{dLr} \right) C_{pB} + F \frac{dx}{dLr} C_{pC} + 2F \frac{dx}{dLr} C_{pD} \right] (T - T_0)}{F(n_{A0} - x)C_{pA} + F(n_{B0} - 3x)C_{pB} + FxC_{pC} + 2Fx C_{pD}}$$

Donde:

$$\frac{dq}{dLr} = U \frac{dA_e}{dLr} (T - T_e)$$

$$dA = \pi dt \, dLr$$

$$\frac{dq}{dLr} = \pi U dt (T - T_e)$$

$$dt = \text{Diámetro tubo}$$

Finalmente:

$$\frac{dT}{dLr} = \frac{F(-\Delta H_{ro}) \frac{dx}{dLr} - \pi U dt (T - T_e) - \left[F \left(-\frac{dx}{dLr} \right) C_{pB} + F \frac{dx}{dLr} C_{pC} + 2F \frac{dx}{dLr} C_{pD} \right] (T - T_0)}{F \left[(n_{A0} - x) C_{pA} + (n_{B0} - 3x) C_{pB} + x C_{pC} + 2x C_{pD} \right]}$$

c).- Caída de presión.-

Se aplica la ecuación (17) P. 1017 Hogen and Watson III.

$$\frac{d\pi}{dLr} = \frac{2fdG^2}{GcFd^{1.7}} \frac{v}{v}$$

Donde:

π = Presión total

Lr = Longitud de empaque

fd = Factor de fricción

gc = Constante de gravitación

G = Masa velocidad

a_v = Superficie de partículas por unidad de volúmen del lecho catalítico

Fd = Fracción de espacio ocupado por las partículas en el lecho

ρ = Densidad del fluido

ρ_p = Densidad media de las partículas

ρ_A = Densidad aparente del lecho

f_d = Nr

Nr = Número de reynolds modificado para lecho catalítico

$$Nr = \frac{G}{a_v \mu}$$

La relación entre f_d y Nr está aproximadamente representada por las dos siguientes ecuaciones:

$$f_d = 2.60 Nr^{-0.3} \quad \text{Cuando Nr varía entre 10 y 150}$$

$$f_d = 1.23 Nr^{-0.15} \quad \text{Cuando Nr varía entre 150 y 300}$$

Además:

$$f_d = 1 - \frac{\rho_A}{\rho_p}$$

$$l_1 = f_1(Lroi, xoi, Toi, oi) Lr$$

$$l_2 = f_1\left(Lroi + \frac{Lr}{2}, xoi + \frac{l_1}{2}, Toi + \frac{m_1}{2}\right) Lr$$

$$l_3 = f_1\left(Lroi + \frac{Lr}{2}, xoi + \frac{l_2}{2}, Toi + \frac{m_2}{2}\right) Lr$$

$$l_4 = f_1(lroi + Lr, xoi + l_3, Toi + m_3) Lr$$

$$x = \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)$$

$$m_1 = f_2(Lroi, xoi, Toi, oi) Lr$$

$$m_2 = f_2\left(Lroi + \frac{Lr}{2}, xoi + \frac{l_1}{2}, Toi + \frac{m_1}{2}, oi + \frac{n_1}{2}\right) Lr$$

$$m_3 = f_2\left(Lroi + \frac{Lr}{2}, xoi + \frac{l_2}{2}, Toi + \frac{m_2}{2}, oi + \frac{n_2}{2}\right) Lr$$

$$m_4 = f_2(Lroi + Lr, xoi + l_3, Toi + m_3, oi + n_3) Lr$$

$$T = \frac{1}{6}(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)$$

$$n_1 = f_3 Lr$$

$$n_2 = f_3 Lr$$

$$n_3 = f_3 Lr$$

$$n_4 = f_3 Lr$$

$$= n_1 = n_2 = n_3 = n_4$$

f).- Resultados obtenidos.-

Los siguientes resultados fueron obtenidos en la computadora electrónica del Centro de Cálculo de la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México.

Únicamente se mencionan las dos últimas aproximaciones.

La segunda aproximación es el tanteo considerado como óptimo; y la primera únicamente se menciona como ilustración.

Primera Aproximación.

Temperatura de enfriamiento inicial 367.1 °K

LONGITUD	CONVERSION	TEMPERATURA	PRESION
0.00	0.0000	523.36	2.00000 -1
1.00	.0090	523.61	2.00000
2.00	.0181	523.87	2.00000
3.00	.0272	524.13	2.00000
4.00	.0363	524.39	2.00000
5.00	.0454	524.65	2.00000
6.00	.0546	524.92	2.00000
7.00	.0637	525.20	2.00000
8.00	.0729	525.47	2.00000
9.00	.0821	525.75	2.00000
10.00	.0913	526.03	2.00000
11.00	.1006	526.31	2.00000
12.00	.1098	526.59	2.00000
13.00	.1191	526.87	2.00000
14.00	.1284	527.15	2.00000
15.00	.1377	527.43	2.00000
16.00	.1470	527.70	2.00000
17.00	.1563	527.95	2.00000
18.00	.1656	528.19	2.00000
19.00	.1750	528.41	2.00000
20.00	.1843	528.60	2.00000
21.00	.1936	528.73	2.00000
22.00	.2028	528.81	2.00000
23.00	.2120	528.79	2.00000

24.00	.2211	528.66	2.00000
25.00	.2301	528.36	2.00000
26.00	.2389	527.85	2.00000
27.00	.2475	527.08	2.00000
28.00	.2557	525.95	2.00000
29.00	.2636	524.39	2.00000
30.00	.2711	522.31	2.00000
31.00	.2780	519.62	2.00000
32.00	.2842	516.24	2.00000
33.00	.2897	512.13	2.00000

-2

La temperatura de enfriamiento cambia a 424.0 °K

34.00	.2949	512.36	2.00000
35.00	.3001	512.57	2.00000
36.00	.3053	512.79	2.00000
37.00	.3105	513.01	2.00000
38.00	.3157	513.22	2.00000
39.00	.3209	513.42	2.00000
40.00	.3261	513.63	2.00000
41.00	.3313	513.82	2.00000
42.00	.3366	514.01	2.00000
43.00	.3418	514.18	2.00000
44.00	.3471	514.34	2.00000
45.00	.3523	514.49	2.00000
46.00	.3575	514.62	2.00000
47.00	.3628	514.73	2.00000
48.00	.3680	514.82	2.00000
49.00	.3732	514.88	2.00000
50.00	.3784	514.91	2.00000

51.00	.3835	514.90	2.00000
52.00	.3887	514.84	2.00000
53.00	.3937	514.74	2.00000
54.00	.3988	514.58	2.00000
55.00	.4038	514.35	2.00000
56.00	.4087	514.06	2.00000
57.00	.4135	513.68	2.00000
58.00	.4183	513.21	2.00000
59.00	.4229	512.64	2.00000
60.00	.4275	511.96	2.00000
61.00	.4319	511.16	2.00000
62.00	.4362	510.23	2.00000
63.00	.4403	509.17	2.00000
64.00	.4442	507.97	2.00000
65.00	.4480	506.62	2.00000
66.00	.4516	505.12	2.00000
67.00	.4550	503.47	2.00000
68.00	.4582	501.68	2.00000
69.00	.4612	499.75	2.00000
70.00	.4640	497.68	2.00000

La conversión lograda en este reactor es .4640 moles por Mol.
 alimentada con un desprendimiento de calor de -1.0648×10^6
 calorías/hora.

NOTAS:

- 1).- Temperatura de enfriamiento 367.1 °K
- 2).- Temperatura de enfriamiento 424 °K

Segunda aproximación.

Temperatura de enfriamiento inicial 367.1 °K

LONGITUD	CONVERSION	TEMPERATURA	PRESION	
0.00	0.0000	523.36	2.00000	-1
1.00	.0090	523.61	2.00000	
2.00	.0181	523.87	2.00000	
3.00	.0272	524.13	2.00000	
4.00	.0363	524.39	2.00000	
5.00	.0454	524.65	2.00000	
6.00	.0546	524.92	2.00000	
7.00	.0637	525.20	2.00000	
8.00	.0729	525.47	2.00000	
9.00	.0821	525.75	2.00000	
10.00	.0913	526.03	2.00000	
11.00	.1006	526.31	2.00000	
12.00	.1098	526.59	2.00000	
13.00	.1191	526.87	2.00000	
14.00	.1284	527.15	2.00000	
15.00	.1377	527.43	2.00000	
16.00	.1470	527.70	2.00000	
17.00	.1563	527.95	2.00000	
18.00	.1656	528.19	2.00000	
19.00	.1750	528.41	2.00000	
20.00	.1843	528.60	2.00000	
21.00	.1936	528.73	2.00000	
22.00	.2028	528.81	2.00000	
23.00	.2120	528.79	2.00000	

24.00	.2211	528.66	2.00000
25.00	.2301	528.36	2.00000
26.00	.2389	527.85	2.00000
27.00	.2475	527.08	2.00000
28.00	.2557	525.95	2.00000
29.00	.2636	524.39	2.00000
30.00	.2711	522.31	2.00000
31.00	.2780	519.62	2.00000
32.00	.2842	516.24	2.00000
33.00	.2897	512.13	2.00000 -2

La temperatura de enfriamiento cambia a 424.5 °K

34.00	.2949	512.40	2.00000
35.00	.3001	512.67	2.00000
36.00	.3053	512.95	2.00000
37.00	.3105	513.23	2.00000
38.00	.3158	513.53	2.00000
39.00	.3210	513.83	2.00000
40.00	.3263	514.14	2.00000
41.00	.3317	514.46	2.00000
42.00	.3370	514.79	2.00000
43.00	.3424	515.14	2.00000
44.00	.3478	515.50	2.00000
45.00	.3533	515.89	2.00000
46.00	.3588	516.29	2.00000
47.00	.3643	516.71	2.00000
48.00	.3699	517.16	2.00000
49.00	.3755	517.65	2.00000
50.00	.3812	518.17	2.00000

51.00	.3869	518.73	2.00000
52.00	.3927	519.35	2.00000
53.00	.3986	520.02	2.00000
54.00	.4046	520.76	2.00000
55.00	.4106	521.59	2.00000
56.00	.4168	522.52	2.00000
57.00	.4232	523.56	2.00000
58.00	.4297	524.76	2.00000
59.00	.4364	526.14	2.00000
60.00	.4434	527.75	2.00000
61.00	.4507	529.64	2.00000
62.00	.4584	531.91	2.00000
63.00	.4666	534.66	2.00000
64.00	.4755	538.07	2.00000
65.00	.4852	542.42	2.00000
66.00	.4964	548.12	2.00000
67.00	.5095	555.99	2.00000
68.00	.5262	567.64	2.00000
69.00	.5503	587.23	2.00000
70.00	.5971	631.06	2.00000

La conversión lograda en este reactor es 0.5971 moles por Mol. alimentada con un desprendimiento de calor de -18867×10^6 calorías/hora.

NOTAS:

- 1).- Temperatura de enfriamiento 367.1 °K
- 2).- Temperatura de enfriamiento 424.5 °K

VII.- SEGURIDAD.-

a).- Toxicidad de los reactivos y productos.-

Anilina y Nitrobenceno.-

Tanto uno como el otro, presentan los siguientes efectos venenosos, cianosis, asfixia, cambios en la naturaleza de la sangre, lo cual puede dañar seriamente la salud y en ocasiones hasta ser fatal. Las máximas concentraciones permisibles de estas sustancias, son 15 p. p. m.

La anilina y el nitrobenceno pueden ser rápidamente absorbidos a través de la piel, no obstante que pueden causar aparentemente efectos crónicos; muchos de los casos reportados son de envenenamiento agudo.

Cuando se presentan casos de envenenamiento agudo, el síntoma más grave que se presenta es el de cianosis, causado en parte por la formación de metino-globina en la sangre. En ocasiones se puede presentar la muerte debido a asfixia, siguiendo a un prolongado estado de envenenamiento. Cambios degenerativos en el hígado y en los riñones pueden presentarse.

Los trabajos que se han expuesto con respecto a la anilina y al nitrobenceno, deben ser revisados para tratar de explicar los cambios en el tinte de la sangre. El contenido de cromógenos o metabolitos diazontables en la orina, pueden servir como medida del índice de anilina absorbida.

En general, la existencia de vapores de anilina o de nitrobenceno, debe ser mantenida en bajas concentraciones y se deben

tomar todas las precauciones necesarias para evitar en lo que sea posible, cualquier contacto de estos líquidos con la piel.

Hidrógeno.-

Es el elemento más ligero que se conoce, importante constituyente del agua, carbohidratos, y de todos los compuestos orgánicos en general.

No se puede considerar como un elemento tóxico, pero si es liberado en grandes cantidades, puede actuar como un simple asfixiante. Como es un gas ligero, tiende a ocupar la parte superior de un local cerrado desalojado al aire, y es frecuente que cause asfixia accidental cuando el local ha sido completamente invadido por su presencia.

El hidrógeno pesado o deuterio, en ciertas formas de vida puede ser tóxico, pero esto no es de importancia industrial; el verdadero peligro de las industrias que manejan hidrógeno, se debe a que éste, es sumamente inflamable y explosivo, al encontrarse en libertad en lugares cerrados. ref. (11 A).

b).- Manejo de los Reactivos y Productos.-

Para asegurar que el equipo que se ha descrito anteriormente tenga las condiciones de seguridad necesarias para que se pueda instalar y manejar en el Laboratorio de Ingeniería Química, es necesario tomar en cuenta los factores de toxicología para tener una base y evitar en todo lo que sea posible, la existencia de un riesgo de accidente.

Reglas de seguridad para el manejo del equipo:

- 1.- Evitar el contacto con la piel.
- 2.- Evitar la inhalación de toda clase de vapores.
- 3.- Controlar y evitar fugas de hidrógeno.
- 4.- Eliminar convenientemente el hidrógeno sobrante.

- 5.- Tener un estricto control en las juntas y válvulas del equipo.
- 6.- Controlar la entrada de agua al condensador, para evitar la salida de vapores y nitrobenceno.
- 7.- Revisar constantemente las temperaturas y presiones.
- 8.- Revisar periódicamente los tambores de abastecimiento de hidrógeno.
- 9.- El equipo debe estar instalado en un espacio grande con corriente de aire.
- 10.- Las conexiones eléctricas deben estar perfectamente aisladas.
- 11.- La corriente de reactivos debe provenir de un tanque cerrado.
- 12.- La corriente de productos debe llegar a un tanque cerrado.
- 13.- El hidrógeno sobrante debe ser ventado y quemado fuera del local.
- 14.- La superficie de calentamiento debe estar perfectamente aislada para evitar quemaduras.
- 15.- Un instructor deberá estar presente siempre que el equipo se encuentre trabajando.
- 16.- Para arrancar, trabajar y manejar el equipo, se deberá tomar el instructivo de manejo, el cual estará al alcance y contendrá toda secuencia de pasos y precauciones que deben efectuarse para el funcionamiento correcto del sistema. Este instructivo será proporcionado por el sustentante, una vez se haya construido y probado el reactor.
- 17.- En caso que por alguna circunstancia fuera del alcance de las medidas de seguridad que se han expuesto, ocurriera alguna anomalía, sea una fuga o el contacto en la piel de alguna persona, o bien el contacto en los ojos, o a la ingestión de anilina o nitrobenceno, se proporciona a continuación un resumido instructivo de tratamientos de emergencia.

c).- Tratamientos de Emergencia.-

Los tratamientos de emergencia de esta reacción, se limitan a los procedimientos de emergencia que cualquier persona puede aprender. Estos procedimientos requieren un mínimo de equipo.

Cualquier lugar en el que se usen sustancias químicas, debe tener regaderas o duchas de seguridad, y fuentes para lavado de los ojos, disponibles en los lugares de trabajo.

Estos dispositivos deben señalarse claramente y darles el mantenimiento debido.

Exposición e Inhalación.-

- 1.- Remover a la persona a un lugar no contaminado; si éste ha perdido el conocimiento, protegerse adecuadamente con una máscara de gases, o algún equipo con suministro propio de aire.
- 2.- Hacer que la persona se acueste manteniéndolo caliente, si se nota la respiración, si ésta se dificulta, sentado puede estar más cómodo.

Si se encuentra inconsciente, asegurar que la lengua no se le vaya hacia atrás; si hay vómito, acostarlo de lado o boca abajo, para evitar que inhale lo vomitado.
- 3.- Si la respiración ha cesado, gritar pidiendo auxilio, y aplicar inmediatamente respiración artificial, continuando hasta que haya vuelto la respiración, o que un médico se haya hecho cargo.
- 4.- Si la respiración se hace difícil y el color del accidentado se torna azul gris, verificar si no existe obstrucción al paso del aire. Si los conductos están libres, se puede administrar oxígeno por medio de una máscara facial, pero

sólo una persona familiarizada con el equipo, puede hacerlo.

6.- Llamar a un médico tan pronto como sea posible.

Exposiciones de la Piel.-

- 1.- Exposiciones pequeñas en la piel, deben ser inmediatamente bañadas con agua en abundancia, y después seguir con una limpieza completa, frotando suavemente con agua y jabón.
- 2.- La ropa contaminada, debe ser removida y la piel lavada con agua corriente, seguida con agua y jabón.
- 3.- Si ocurre el contacto con una gran parte de la piel o de la ropa, la persona debe correr a la ducha de seguridad más cercana, y quitarse la ropa mientras está recibiendo el baño.
- 4.- Un médico debe examinar aquéllos casos que muestren efectos sobre la piel, o aquéllos en quienes aparezcan síntomas de enfermedades sistemáticas.

Ingestión.-

- 1.- Hacer que la víctima vomite lo más pronto posible. Esto se puede lograr, haciendo que trague gran cantidad de agua, e introduciendo un dedo en la garganta.
- 2.- Llamar inmediatamente a un médico.
- 3.- Mantener al afectado acostado, caliente y cómodo.

Exposición de los Ojos.-

- 1.- Acudir inmediatamente a la fuente lavaojos, o a cualquier otra fuente de agua limpia y corriente.
- 2.- Levantar los párpados con los dedos y permitir que el agua bañe los ojos.
- 3.- Dar vuelta a los ojos, para permitir que el agua bañe toda su superficie.

4.- Continuar el lavado de emergencia durante 15 minutos.

5.- Llevar al afectado tan pronto como sea posible con un médico especialista.

Comentarios al respecto.-

Se habrá notado, que las medidas de primeros auxilios para el contacto con sustancias químicas, dependen en gran parte del uso copioso de agua corriente. Esto se basa en tres factores: Primero, el agua no hace daño a nadie. Segundo, el agua corriente remueve las sustancias químicas por solución, dilución y acción mecánica. Tercera, el agua está disponible en casi todo lugar de una planta.

En algunos casos, se necesitan medios específicos para tratamientos de emergencia. Haciendo referencia a las Chemical Safety Data Sheets de la Manufacturing Chemists Association, se obtendrá el tratamiento específico de emergencia para determinadas sustancias.

Del fabricante de un producto se pueden obtener generalmente, instrucciones específicas para cuidado de emergencia y éstas deben ser obtenidas antes del uso de la sustancia.

Se considera como una buena práctica, el que una planta tenga un arreglo con algún médico en riesgos de la planta y prepararse para hacer frente a cualquier emergencia. Además, dicho médico debe hacer los exámenes físicos de admisión, los cuales se están convirtiendo en una práctica aceptada más y más en la industria, así como los exámenes médicos periódicos, si éstos son deseados en la compañía. Su familiarización con las políticas de la planta y los procesos de manefactura serán de gran ayuda a la colocación adecuada del personal.

VIII.- CONCLUSIONES.-

- 1.- Los resultados obtenidos indican que es factible llevar a la práctica el problema propuesto.
- 2.- El mismo cálculo prevee el uso de dos etapas de enfriamiento para evitar que suba demasiado la temperatura de reacción.
- 3.- La temperatura de 350 °C para la iniciación de la reacción da resultados favorables.
- 4.- Los medios de enfriamiento pueden ser vapores saturados a esas temperaturas, o bien líquidos con puntos de ebullición determinada.
- 5.- Todas las consideraciones de cálculo tomadas en los diferentes capítulos, se suponen correctas, ya que la conversión esperada era de un 70 % y la calculada resultó 60 %.
- 6.- Los costos de operación y construcción no fueron calculados ya que carecen de interés por tratarse de un sistema experimental que sirva como base a estudios subsecuentes.
- 7.- La etapa de condensación y separación de productos no fue calculada para evitar hacer este trabajo demasiado extenso, y aunque es un problema secundario sería un cálculo tan complejo que puede ser tomado como tema de Tesis para suplementar lo aquí expuesto.
- 8.- Por último, se recomienda la aplicación práctica del diseño pues representaría una fuente inagotable de experimentación para la misma aplicación y de otras similares.

X.- BIBLIOGRAFIA.-

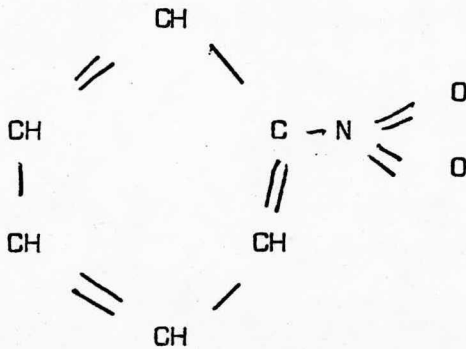
- (1A) Industrial Chemicals. 3a Ed.
W. L. Faith, Donald B. Keyes & Ronald L. Clark.
John Wiley, New York.
- (2A) Encyclopedia of Chemical Technology. 2a Ed.
Raymond E. Kirk, Donald F. Othmer.
Interscience, New York.
- (3A) Unit Process in Organic Synthesis. 4a Ed.
Philip H. Groggins.
Mc Graw Hill Book Co.
- (4A) Catalytic Hidrogenation.
Robert L. Augustine
Marcel Dekker Inc., 1965
- (5A) Catalytic Chemistry
Henry W. Lohse
Chemical Publishing Co.
- (6A) Catalysis in Practice.
C. H. Collier.
Reinhold Publishing Co.
- (7A) Reaction Kinetics for Chemical Engineers.
Stanley M. Walas.
Mc Graw Hill Book Co.
- (8A) Chemical Process Principles.
Olaf A. Hougen, Keneth M. Watson & Roland A. Regatz
John Wiley, New York.
- (9A) Kinetics and Mechanism.
Arthur A. Frost & Ralph G. Pearson.
John Wiley, New York.

- (10A) Chemical Engineering Kinetics.
J. M. Smith.
Mc Graw Hill Book Co.
- (11A) The Chemistry of Industrial Toxicology
Hervey Bertrand Elkins
John Wiley, New York
- (12A) Chemical Engineers' Handbook.
John H. Perry.
Mc Graw Hill Book Co.
- (13A) The Properties of Gases and Liquids.
Robert. C. Reid, John M. Prausnitz & Thomas K. Sherwood.
Mc Graw Hill Book Co.
- (1B) Higiene.- Manejo de Sustancias Químicas.
Traducción del Safety Guide de la MCAI. Octubre 1965
- (2B) Industrial and Engineering Chemistry
K. H. Lin, J. A. Palermo., Vol 59 nº 1 January 1967
- (3B) Industrial and Engineering Chemistry
IDEM. Part 2 Vol 59 nº 2 February 1967.
- (4B) I & EC. Process Design And Development.
Kinetics of Catalytic Vapor Phase Hydrogenation of Nitrobenzene
to Aniline. Vol 4 nº 4 October 1965
D. N. Rihani, T. K. Narayanan & L. K Doraiswami
- (5B) Industrial and Engineering Chemistry.
Keki H. Ghada & C. N. Sliepcevich.
Hydrogenating Nitrobenzene to Aniline. Vol 52, May 1960
- (1C) O. W. Brown and C. O. Henke
Catalytic Preparation of Aniline.
- (2C) Catalytic Activity of Tin.
- (3C) Catalytic Preparation of Azobenzene and Aniline.
- (4C) The Catalytic Activity of Cobalt mixed With Certain Metals For
The Gas Phase Reduction of Nitrobenzene to Aniline.
(1C), (2C), (3C) y (4C) Mismos Autores.
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 26 161, 272, 321, 631, 636, 1922.

IX.- APENDICE.-

1.- ESTIMACION DE CONSTANTES Y PROPIEDADES INVOLUCRADAS EN EL CALCULO DE LA CORRIENTE DE ALIMENTACION DE NITROBENCENO.-

a).- Estimación de las propiedades críticas por contribución de grupos:



	ΔT	ΔP	ΔV
5 = CH	5(0.011)	5(0.154)	5 x 37
1 = C -	0.011	0.154	37
1 - N =	0.007	0.13	32
1 - O -	2(0.021)	2x(0.16)	2x(20)
	<u>0.1150</u>	<u>1.374</u>	<u>294</u>

$$(\Delta T)^2 = 0.0132$$

Temperatura crítica.-

$$\frac{T_b}{T_c} = 0.567 + [\pm \Delta T - (\pm \Delta T)^2]$$

$$T_b = 210 \text{ } ^\circ\text{C} = 483 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$(\Delta T)^2 = 0.0132$$

$$\frac{210}{T_c} = 0.567 + (0.1150 - 0.0132) = .668$$

$$T_c = \frac{483}{0.668} = 723.05 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$T_c = 724 \text{ } ^\circ\text{K}$$

Presión crítica.-

$$\sqrt{\frac{M}{P_c}} = 0.34 + P$$

$$\Delta P = 1.374$$

$$PM = 123$$

$$\sqrt{\frac{123}{P_c}} = 0.34 + 1.374 = 1.714$$

$$\frac{123}{P_c} = 2.9378$$

$$P_c = \frac{123}{2.9378} = 41.86$$

$$P_c = 41.86 \text{ ATM}$$

Volúmen crítico.-

$$V_c = 40 + V$$

$$V_c = 40 + 294 = 334$$

$$V_c = 0.334 \text{ lt.}$$

b).- Densidad del fluido a la entrada del reactor.-

Cálculo de Z

$$T_c = 724.61 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$P_c = 90.89 \text{ atm.}$$

$$V_c = 0.334 \frac{\text{lt}}{\text{g mol}}$$

$$Z_c = \frac{P_c V_c}{RT_c}$$

$$Z_c = \frac{40.50 \text{ atm.} \times 0.334 \text{ lt.}}{0.082 \frac{\text{lt. atm.}}{\text{g mol } ^\circ\text{K}} \times 724.61 \text{ }^\circ\text{K g mol}} = 0.2276$$

a 302 °C = 575 °K

$$T_c = \frac{575}{724} = 0.7941$$

$$\pi_{12} = \frac{1}{40.50} = 0.0246$$

$$\pi_{12} = 0.01$$

$$\text{Tr} = 0.70 \quad Z = 992 \quad \text{Db} = 0.07$$

$$\text{Tr} = 0.80 \quad Z = 993 \quad \text{Db} = 0.01$$

$$\overline{\text{Tr}} = 0.05$$

$$\text{Tr} = 0.70 \quad Z = 943 \quad \text{Db} = .33$$

$$\text{Tr} = 0.80 \quad Z = 960 \quad \text{Db} = .13$$

1a. Interpolación:

$$\text{Tr} = 0.7941$$

$$\overline{\text{Tr}} = 0.01 \quad Z = 0.993 \quad \text{Db} = 0.016$$

2a. Interpolación:

$$\text{Tr} = 0.7941$$

$$\overline{\text{Tr}} = 0.05 \quad Z = 0.9583 \quad \text{Db} = 0.197$$

3a. Interpolación:

$$\text{Tr} = 0.794$$

$$\overline{\text{Tr}} = 0.0246 \quad Z = 0.980 \quad \text{Db} = 0.0820$$

Corrección por Z_c :

$$Z' = Z + D (Z_c - 0.27)$$

$$Z' = 0.980 + 0.0820 (.2276 - .27)$$

$$Z' = 0.9765$$

Base 1 Mol de Nb :

$$PM_{H_2} = 2$$

$$PM_{Nb} = 119$$

Hidrógeno	83.33 %	5 g mol
Nitrobenceno	16.67 %	1 g mol
	<hr/>	<hr/>
	100.00	6 g mol

$$H \quad 2 \times 0.833$$

$$Nb \quad 123 \times 0.167$$

$$22.20$$

$$\overline{PM} = 22.20$$

Ya que para Nb es 0.9761 para el hidrógeno se puede considerar $Z = 1$, puede entonces considerarse comportamiento de gas ideal.

$$T = 275 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$T = 548 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$P = 2 \text{ atm.}$$

$$M \text{ mezcla} = (123 \times 1) + 2(5) = 133$$

$$V = 6 \times 359 \frac{14.7}{29.40} \times \frac{548}{273.2}$$

$$V = 2160.1 \text{ ft}^3$$

$$\rho = \frac{M \text{ mezcla}}{V} = \frac{133 \text{ lb}}{2160.1} = 0.06157 \text{ lb/ft}^3$$

$$\rho_M = 0.06157 \text{ lb/ft}^3$$

c).- Densidad a la salida del reactor.-

Las condiciones de salida del reactor tienen que ser supuestas, por consiguiente serán fijadas como sigue:

$$x_f = 0.70$$

$$\Delta \pi = 6 \text{ psi} = 0.44 \text{ ATM.}$$

$$\pi_f = \pi_1 - \Delta \pi$$

$$\pi_f = 1.56 \text{ atm.}$$

$$T_2 = 350 \text{ }^\circ\text{C} = 623 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$\rho_2 = \rho_1 \times \frac{\pi_2}{\pi_1} \times \frac{T_2}{T_1} = 0.06157 \times \frac{1.56}{2} \times \frac{548}{623}$$

$$\rho_2 = 0.0424 \text{ lb/ft}^3$$

d).- Densidad media estimada.-

$$\rho_m = \frac{1 + 2}{2} = \frac{0.06157 + 0.0424}{2}$$

$$\rho_m = 0.05198 \text{ lb/ft}^3$$

e).- Cálculo del diámetro equivalente.-

El tubo con el lecho catalítico, llevará insertada una resistencia enrollada en un tubo refractario, como medio de calentamiento para llegar a la temperatura de ignición.

Este conjunto, se ha estimado tendrá aproximadamente $\frac{1}{2}$ pulgada de diámetro.

$$D = 2'' \quad \text{Tubo de acero inoxidable 316 BWG}$$

$$S = 0.0233 \text{ ft}^2 = 3.355 \text{ pulg.}^2$$

Para la resistencia:

$$D = 0.5 \text{ inch.}$$

$$S = 0.785 \times 0.5^2 = 0.19625 \text{ pulg.}^2$$

$$S_r = 0.0036 \text{ ft}^2$$

$$S' = S - S_r = 3.355 - 0.19625$$

$$S' = 3.159 \text{ pulg.}^2$$

$$De = \left(\frac{3.159}{0.785} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$De = 4.024^{\frac{1}{2}}$$

$$De = 2.0059 \text{ pulg.}$$

f).- Estimación de la alimentación.-

$$H_2/Nb = 5$$

$$W/F_1 = 25 \frac{\text{g cat}}{\text{g mol}}$$

$$F_1 = F + F'$$

$$\frac{W}{F + F'} = 25 \frac{\text{g cat}}{\text{g mol}}$$

F = Alimentación de nitrobenzeno

F' = Alimentación de hidrógeno

Se = Area de sección equivalente

G = Masa velocidad

ρ = Densidad

v = Velocidad

$$G = \rho v$$

$$G = \frac{F_1}{S_e}$$

$$\frac{F_1}{S} = \rho_v$$

$$F_1 = \rho_v S_e$$

Según experiencias reportadas en la referencia (4B), a partir de una velocidad de 3 ft/min, el efecto de transferencia de masa puede considerarse nulo.

Para que posteriormente se pueda hacer una correcta estimación de la corriente de alimentación, se efectuará una tabulación fijando la velocidad a partir de 3 ft/min.

Tabla No. 1 - 1

V	F ₁	F ₁	F ₁	F	F	W
ft/min	lb/h	g/h	g mol/h	g mol Nb/h	gNb/h	gr. cat.
3	0.2432	110.39	4.9725	0.8287	101.93	124.31
25	2.026	919.80	41.432	6.905	849.31	1035.80
30	2.4315	1103.90	49.725	8.287	1019.30	1243.12
50	4.052	1839.60	82.864	13.810	1699.63	2071.60
75	6.078	2759.41	124.298	20.716	2548.06	3107.45
100	8.105	3679.67	165.750	27.625	3397.87	4143.75
250	20.262	9198.94	414.367	69.061	8494.50	10369.17
500	40.525	18398.35	828.754	138.126	16989.50	20718.85
750	60.787	27597.29	1243.720	207.187	25484.00	31093.02
1000	81.050	36796.70	1657.509	276.251	33978.87	41437.75

$$\frac{W}{F_1} = 25 \frac{\text{gr. cat.}}{\text{gr. mol. tot.}}$$

$$F = F_1 - F'$$

Relación H a Nb = 5

2.- ESTIMACION DE CONSTANTES Y PROPIEDADES INVOLUCRADAS EN EL CALCULO DEL CALOR DE REACCION.-

Estimación del Cp para nitrobenceno:

$$\text{Unidades cal/ g mol } ^\circ\text{K} = \text{BtV/mol } ^\circ\text{K}$$

Grupo base	Constantes de capacidad calorífica		
	a	b(10 ³)	c(10 ⁶)
Benceno	-4.20	91.30	-36.63
CH ₃ sust. H (1)	0.78	16.68	- 5.41
NO ₂ sust. CH ₃ (2)	6.3	19.53	10.36
Constantes finales	2.88	88.45	-31.68

Ecuación final:

$$C_{p_{\text{NO}_2}} = 2.88 + 88.45 \times 10^{-3} T - 31.68 \times 10^{-6} T^2$$

T en °K

Estimación del Cp para anilina:

Grupo base	Constantes de capacidad calorífica		
	a	b(10 ³)	c(10 ⁶)
Benceno	-4.20	91.30	-36.63

(1) Tabla 72

(2) Tabla 76 Chemical Process Principles Hougén and Watson.

CH ₃ sust. H (1) ⁺	0.78	16.68	-5.41
NH ₂ sust. CH ₃ (2) ⁺	<u>1.26</u>	<u>7.32</u>	<u>2.23</u>
Constantes finales:	-2.16	+100.66	-39.81

$$C_{p_{NH_2}} = -2.16 + 100.66 \times 10^{-3} T - 39.81 \times 10^{-6} T^2$$

T en °K

Estimación del calor de reacción considerando el efecto de la temperatura:

Ecuación de Kirchhoff:

$$d\Delta H = (C_{p^*} - C_p) dT = \Delta C_p dT \quad (1)$$

C_{p^*} = Total de productos

C_p = Total de reactivos

Como:

$$C_p = a + bT + cT^2 \quad (2)$$

Entonces:

$$\Delta C_p = \Delta a + \Delta bT + \Delta cT^2 \quad (3)$$

(1)⁺ Tabla 72

(2)⁺ Tabla 76

Chemical Process Principles Hougen and Watson.

Donde para la reacción: A + B \longrightarrow D + C

$$\Delta a = n_D a_D + n_C a_C - n_A a_A + n_B a_B$$

$$\Delta b = n_D b_D + n_C b_C - n_A b_A + n_B b_B$$

$$\Delta c = n_D c_D + n_C c_C - n_A c_A + n_B c_B$$

Sustituyendo (3) en (1)

$$d\Delta H = [\Delta a + \Delta bT + \Delta cT^2] dT$$

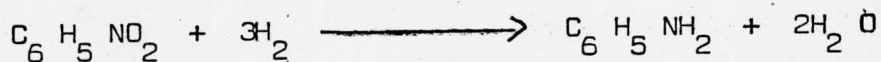
Integrando:

$$\Delta H_T = IH + \Delta aT + \frac{1}{2}\Delta bT^2 + \frac{1}{3}\Delta cT^3$$

Donde IH es una constante de integración que puede evaluarse por un simple valor ΔH a T coincida, lo más usual es tomar:

$$\Delta H_T = \text{cal/g mol}$$

Estimación de $\Delta H_{RO}]_T = 25^\circ\text{C}$



A partir de los calores de combustión (Tabla 30 pag. 306 Hougen and Watson).

$$H_R = \sum(\Delta H_c \text{ react.}) - \sum(\Delta H_c \text{ prod.})$$

$$\Delta H_{R2} = -68.3174 \frac{\text{Kcal}}{\text{gmol}}$$

$$\Delta H_{Nb} = -739 \frac{\text{Kcal}}{\text{gmol}}$$

$$\Delta H_{AN} = -812 \frac{\text{Kcal}}{\text{gmol}}$$

$$\Delta H_{R25} \text{ } ^\circ\text{C} = (-739) + 3(-68.374) - (-812)$$

$$\Delta H_{R25} \text{ } ^\circ\text{C} = -131.952 \frac{\text{Kcal}}{\text{gmol}}$$

$$C_p = a + bT + cT^2$$

$$C_{p_{\text{NO}_2}} = 2.88 + 88.45 \times 10^{-3} T - 31.68 \times 10^{-6} T^2$$

$$C_{p_{\text{NH}_2}} = 2.16 + 100.66 \times 10^{-3} T - 39.81 \times 10^{-6} T^2$$

$$C_{p_{\text{H}_2}} = 6.946 - 0.196 \times 10^{-3} T - 0.4757 \times 10^{-6} T^2$$

$$C_{p_{\text{N}_2\text{O}}} = 7.136 + 2.640 \times 10^{-3} T + 0.0459 \times 10^{-6} T^2$$

$$\Delta C_p = \Delta a + \Delta bT + \Delta cT^2$$

$$\Delta a = (-216) + 2(7.136) - (2.88) - 3(6.946) = -11.606$$

$$\Delta b = (100.66) + 2(2.640) - (88.45) - 3(-0.196) \times 10^3 = 16.902 \times 10^3$$

$$\Delta c = (-39.81) + 2(0.0459) - (-31.68) - 3(0.4757) \times 10^6 = 9.465 \times 10^6$$

$$\Delta C_p = -11.606 + 16.902 \times 10^3 T - 9.465 \times 10^6 T^2$$

$$\Delta H_T = I_H - 11.606T + \frac{16.902}{2} \times 10^{-3} T^2 - \frac{9.465}{3} \times 10^{-6} T^3$$

$$\Delta H_T = I_H - 11.606T + 8.45 \times 10^{-3} T^2 - 3.16 \times 10^{-6} T^3$$

$$\Delta H_{T25} \text{ } ^\circ\text{C} = 131952 \text{ cal/g}$$

$$I_H = -131952 + 11.606T - 8.45 \times 10^{-3} T^2 + 3.16 \times 10^{-6} T^3$$

$$T = 25 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$T = 298 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$T^2 = 88804$$

$$T^3 = 26463592$$

$$\Delta H_R = 129160 + 11.606T - 845 \times 10^{-3} T^2 + 3.16 \times 10^{-6} T^3$$

$$\Delta H_T = 129160 + 11.606T - 8.45 \times 10^{-3} T^2 + 3.16 \times 10^{-6} T^3$$

$$\Delta H_T = 129160 + 7230.53 - 3279.69 + 764.10$$

$$\Delta H_T = 124445 \text{ cal/g mol}$$

$$\Delta H_T = 124.445 \text{ KCal/gmol}$$

Estimación de ΔH_R por medio de la ecuación reportada en la ref. (4B).

$$\Delta H_{RO} = 108961 - 15.04T + 1.725 \times 10^{-2} T^2 - 1.127 \times 10^{-5} T^3 + 3 \times 10^{-9} T^4$$

Estimación de H_R por medio de la ecuación reportada en la referencia (4C).

Tabla No. 1 - 2

T°C	T°K	T ²	T ³	T ⁴
302	575	330625	190109375	109312890625
310	583	339889	198155287	115524532321
315	588	345744	203297472	119538913536
320	593	351649	208527857	123657019201
325	598	357604	213847192	127280620816
330	603	363609	219256227	132211504881
335	608	369664	224755712	136651472896
340	613	375769	230346397	141202341361
345	618	381924	236029032	145865941776
350	623	388129	241804367	150644120641

Tabla No. 2 - 2

T°K	+108961	$+15.04T - 1.725 \times 10^{-2} T^2 + 1.127 \times 10^{-5} T^3 - 3 \times 10^{-9} T^4$				ΔH_R
575	108961	8648.00	5703.28	2142.23	327.93	113720
583	108961	8768.32	5863.08	2233.21	346.57	113752
588	108961	8843.52	5964.08	2291.16	358.61	113772
593	108961	8918.72	6065.94	2350.10	370.97	113792
598	108961	8993.92	6168.66	2410.06	381.84	113814
603	108961	9069.12	6272.25	2471.02	396.63	113832
608	108961	9144.32	6376.70	2532.99	409.95	113851
613	108961	9219.52	6482.01	2596.00	423.60	113870
618	108961	9294.62	6588.18	2660.04	437.50	113889
623	108961	9369.92	6695.22	2725.13	451.93	113908

Estimación de ΔH_R por medio de la ecuación desarrollada a partir de la ecuación de Kirchhoff.

$$\Delta H_R = -129160 + 11.606T - 845 \times 10^{-3} T^2 + 3.16 \times 10^{-6} T^3$$

Tabla No. 3 - 2

T°K	+129160	-11.606T	+8.45x10 ³ T ²	-3.16x10 ⁶ T ³	- ΔH_R
575	129160	6673.45	2793.98	600.74	124679
583	129160	6766.29	2872.06	626.17	124639
588	129160	6824.32	2921.53	642.41	124614
593	129160	6882.35	2971.43	658.94	124590
598	129160	6940.38	3021.95	675.75	124565
603	129160	6998.41	3072.49	692.84	124541
608	129160	7056.44	3123.66	710.22	124517
613	129160	7114.47	3175.24	727.89	124492
618	129160	7172.50	3227.25	745.58	124463
623	129160	7230.53	3279.69	764.10	124445

3.- ESTIMACION DE CONSTANTES Y PROPIEDADES INVOLUCRADAS EN EL CALCULO DEL CALOR RETIRADO.-

a).- Número de reynolds modificado estimado a las condiciones promedio a lo largo del reactor:

$$\text{Rep} = \frac{G}{a_v \mu_1}$$

Masa velocidad:

$$G = \frac{F_1}{S_e} = \frac{0.2431 \text{ lb}}{0.02194 \text{ ft}^2 \text{ hr}} = 11.075 \frac{\text{lb}}{\text{hft}^2}$$

Viscosidad:

Ecuación (102) P. 872 Hougen and Watson. III

$$\mu_c = \frac{7.70 \sqrt{PM} (P_c)^{2/3}}{T_c^{1/6}}$$

μ_c = Viscosidad a las condiciones críticas

PM = Peso molecular

Pc = Presión crítica (atm.)

Tc = Temperatura crítica °K

Anilina:

PM = 93

Tc = 699

Pc = 52.4 atm.

$$\Delta H_v = 103.68 \frac{\text{cal}}{\text{gr}}$$

$$\mu_c = \frac{7.70 \times (93)^{2/3}}{(699)^{1/6}} = \frac{7.70 \times 9.6436 \times 14}{2.979}$$

$$\mu_c = 349 \text{ micropoises}$$

Nitrobenceno:

$$PM = 123$$

$$T_c = 724 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$P_c = 41.86 \text{ atm.}$$

$$\mu_c = \frac{7.70 \times (123)^{1/2} \times (41.86)^{2/3}}{(724)^{1/6}} = \frac{7.70 \times 11.09 \times 12.05}{3}$$

$$\mu_{cA} = 343 \text{ micropoises}$$

+ Para agua.-

$$PM = 18$$

$$T_c = 647.3 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$P_c = 218.2$$

$$\mu_{cD} = 495 \text{ micropoises}$$

Para hidrógeno:

$$PM = 2$$

+ Tabla LV P. 873 Hougen and Watson III

$$T_c = 33.3 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$P_c = 12.80$$

$$\mu_B = 34.70 \text{ micropoises}$$

b).- Cálculo de la viscosidad media de la mezcla en el reactor.

1.- Entrada.

$$N_{A1} = \frac{N_{A0}}{N_t} = \frac{1}{6} = 0.16667$$

$$N_{B1} = \frac{N_{B0}}{N_t} = \frac{5}{6} = 0.8333$$

$$N_{C1} = 0$$

$$N_{D1} = 0$$

$$\mu'c = 0.16667 \times 343 + 0.8333 \times 34.70 = 86.08$$

$$T'c = 0.16667 \times 724 + 0.8333 \times 33.3 = 148.41 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$P'c = 0.16667 \times 41.8 + 0.8333 \times 12.80 = 17.63 \text{ atm.}$$

$$T'r = \frac{548}{148.41} = 3.692$$

$$P'r = \frac{2}{17.63} = 0.113$$

De la figura 175 Hougen and Watson III:

$$\mu_r = 1.38$$

$$\mu = \mu_r \mu'c$$

$$\mu = 118.70 \text{ micropoises.}$$

2.- Salida.

Suponiendo que se va a llegar a una conversión final de 70 % :

Se tiene la siguiente relación.

$$N_{A2} = \frac{n_A}{n_T} = \frac{1-x}{6-x} = \frac{1-0.70}{6-0.70} = 0.057$$

$$N_{B2} = \frac{n_B}{n_T} = \frac{5-3x}{6-x} = \frac{5-3 \times 0.70}{6-0.70} = 0.547$$

$$N_{C2} = \frac{n_C}{n_T} = \frac{x}{6-x} = \frac{0.70}{6-0.70} = 0.123$$

$$N_{D2} = \frac{n_D}{n_T} = \frac{2x}{6-x} = \frac{2 \times 0.70}{6-0.70} = 0.264$$

Condiciones de salida.-

Fijando las más drásticas:

$$T_c = 350 \text{ }^\circ\text{C} = 623 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$\Delta P = 5 \text{ Psi}$$

$$P = 2 - \frac{5}{11.30} = 1.56 \text{ atm.}$$

$$PM_2 = 25.13$$

$$u'_{c2} = 0.057 \times 343 + 0.547 \times 34.70 + 0.132 \times 349 + 0.264 \times 495 = 215.27 \text{ mp.}$$

$$T_c = 0.057 \times 724 + 0.547 \times 33.3 + 0.132 \times 699 + 0.264 \times 647.3 = 322.63 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$P_c = 0.057 \times 41.86 + 0.547 \times 12.80 + 0.132 \times 52.4 + 0.264 \times 218.2 = 73.90 \text{ a}$$

$$Tr = \frac{623}{322.63} = 1.93$$

$$Pr = \frac{1.56}{73.90} = 0.021$$

Fig. 175 Hougen and Watson III.

$$\mu_{R_2} = 0.87$$

$$\mu_2 = \mu_{R_2} \mu_{C_2}$$

$$\mu_2 = 0.87 \times 215.27 = 187.28 \text{ MP.}$$

$$\mu_m = 153 \text{ MP}$$

$$\mu_m = 0.0153 \text{ Cp.} \times 2.42 \frac{\text{lb}}{\text{ft-hrCp}}$$

$$\mu_m = 0.0370 \frac{\text{lb}}{\text{ft - hr}}$$

c).- Estimación de la conductividad térmica media por el método de propiedades generalizadas.

Entrada:

$$t_1 = 275 \text{ }^\circ\text{F}$$

$$T_1 = 548 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$P_1 = 2 \text{ atm.} = 22.6 \text{ lb/pulg}^2 \text{ absolutas; Pat.} = 11.3 \text{ lb/pulg}^2$$

1).- Nitrobenceno.-

$$Pr = \frac{2}{41.86} = 0.5$$

$$Tr = \frac{548}{724} = 0.75$$

Para nitrobenceno a 212 °F

$$k = 0.088 \text{ btu/hr ft}^2 \text{ (}^\circ\text{F/ft)}$$

A estas mismas condiciones:

$$Pr = \frac{1}{41.86} = 0.025$$

$$Tr = \frac{373}{724} = 0.52$$

En la figura 3 - 60 Perry 4a. Edición:

$$\frac{k}{kc} = 0.185$$

De donde

$$kc = \frac{k}{0.185} = \frac{0.088}{0.185} = 0.47 \text{ btu/hr ft}^2 \text{ (}^\circ\text{F/ft)}$$

Con el valor de k_c y las condiciones de entrada, nuevamente se emplea la citada figura.

$$\frac{k}{k_c} = 0.25$$

De donde

$$k = 0.25 k_c$$

$$k_{A_1} = 0.117$$

Salida nitrobenzeno

$$P = 1.56 \text{ atm}$$

$$T = 350 \text{ }^\circ\text{C} = 623 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$Pr = \frac{1.56}{41.86} = 0.037$$

$$Tr = \frac{623}{724} = 0.86$$

De la misma figura

$$\frac{k}{k_c} = 0.30$$

$$k_{A_2} = 0.47 \times 0.30$$

$$k_{A_2} = 0.141$$

2).- Hidrógeno.-

En la gráfica adjunta desarrollada a partir de los datos de la Tabla 5 pag. 801 Kern.

Entrada

$$t = 275 \text{ }^\circ\text{C} = 527 \text{ }^\circ\text{F}$$

$$P = 2 \text{ atm}$$

$$k_{B_1} = 0.1705$$

Salida

$$t = 350 \text{ } ^\circ\text{C} = 662 \text{ } ^\circ\text{F}$$

$$P = 1.56 \text{ atm}$$

$$k_{B_2} = 0.1853$$

A bajas presiones se puede suponer que esta no influye.

Las unidades de k son en todos los casos:

$$K = \text{Btu/h ft}^2(^\circ\text{F/ft})$$

Para el cálculo de la conductividad térmica del hidrógeno y del vapor de agua se construyeron las respectivas gráficas de k contra temperatura a partir de los datos dados en la tabla número 5 en la página número 801 del libro

PROCESS HEAT TRANSFER

DONALD Q. KERN

MC GRAW HILL BOOK.

Así mismo para el cálculo de las conductividades térmicas de nitrobenzeno y anilina se usó la figura 3 60 del libro:

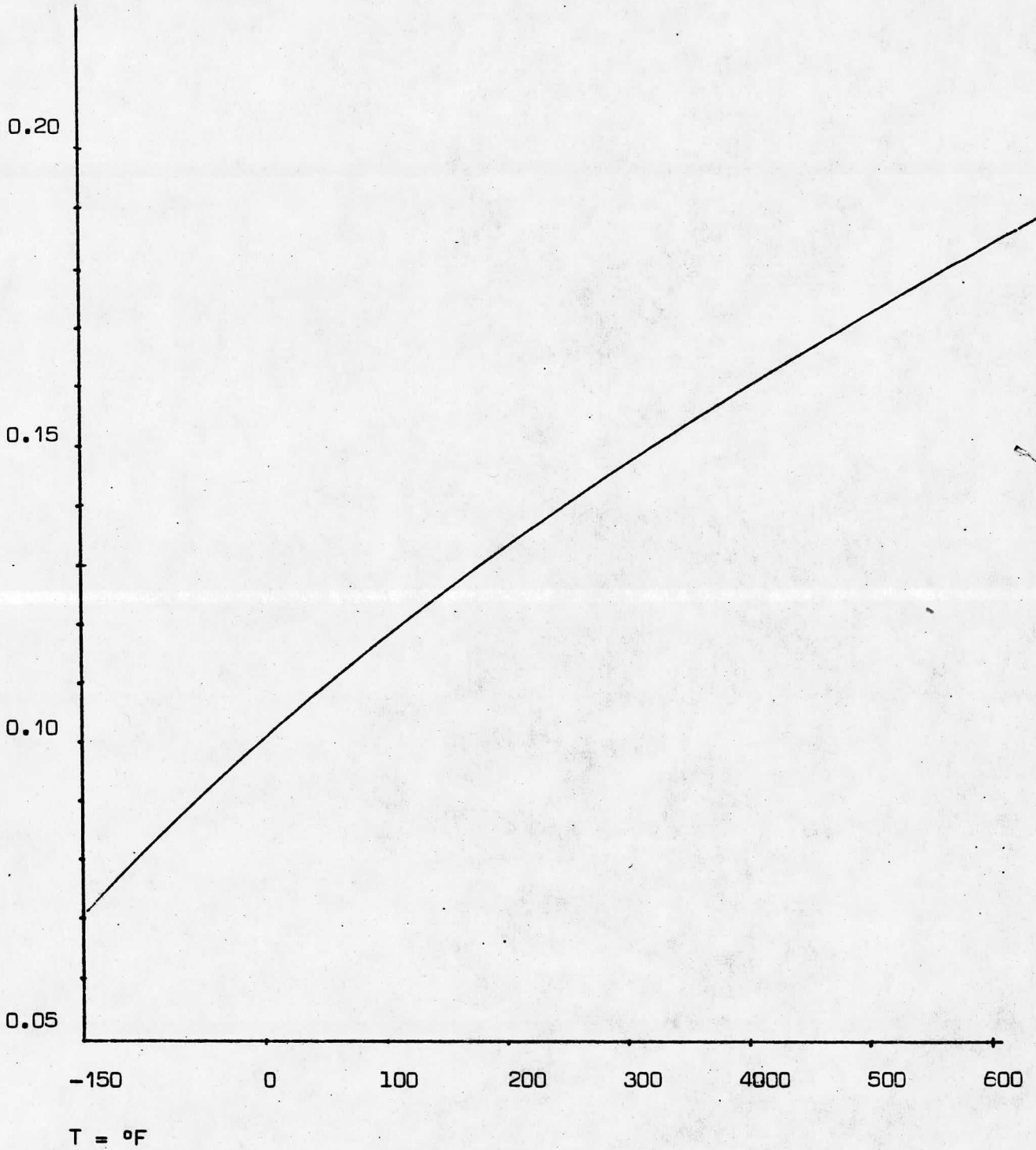
CHEMICAL ENGINEER'S HANDBOOK

JOHN H. PERRY

MC GRAW HILL BOOK.

Conductividad térmica de hidrógeno contra temperatura.

$$k = \text{Btu/h ft}^2 (\text{°F/ft})$$



3).- Anilina.-

$$A \text{ 68 } ^\circ\text{F y 1 atm.} \quad k = 0.100$$

$$68 \text{ } ^\circ\text{F} = 20 \text{ } ^\circ\text{C} = 293 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$Tr = \frac{293}{699} = 0.42$$

$$Pr = \frac{1}{52.4} = 0.02$$

De la fig. 3 - 60 Perry 4a. Edición.

$$\frac{k}{kc} = 0.15$$

$$kc = \frac{k}{0.15}$$

$$kc = 0.66$$

Entrada

$$Tr = \frac{548}{699} = 0.78$$

$$Pr = \frac{2}{52.4} = 0.04$$

De la figura misma

$$\frac{k}{kc} = 0.26$$

$$k_{C_1} = 0.171$$

Salida

$$Tr = \frac{623}{699} = 0.89$$

$$Pr = \frac{1.56}{52.4} = 0.03$$

De la fig.

$$\frac{k}{kc} = 0.31$$

$$k = 0.31 \times 0.66$$

$$k = 0.204$$

4).- Vapor de agua.-

En la gráfica adjunta.

Entrada

$$t = 527 \text{ }^\circ\text{F} = 275 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$P = 2 \text{ atm}$$

$$k_{D_1} = 0.02195$$

Salida

$$t = 662 \text{ }^\circ\text{F} = 350 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$P = 1.56 \text{ atm}$$

$$k_{D_2} = 0.0261$$

Finalmente:

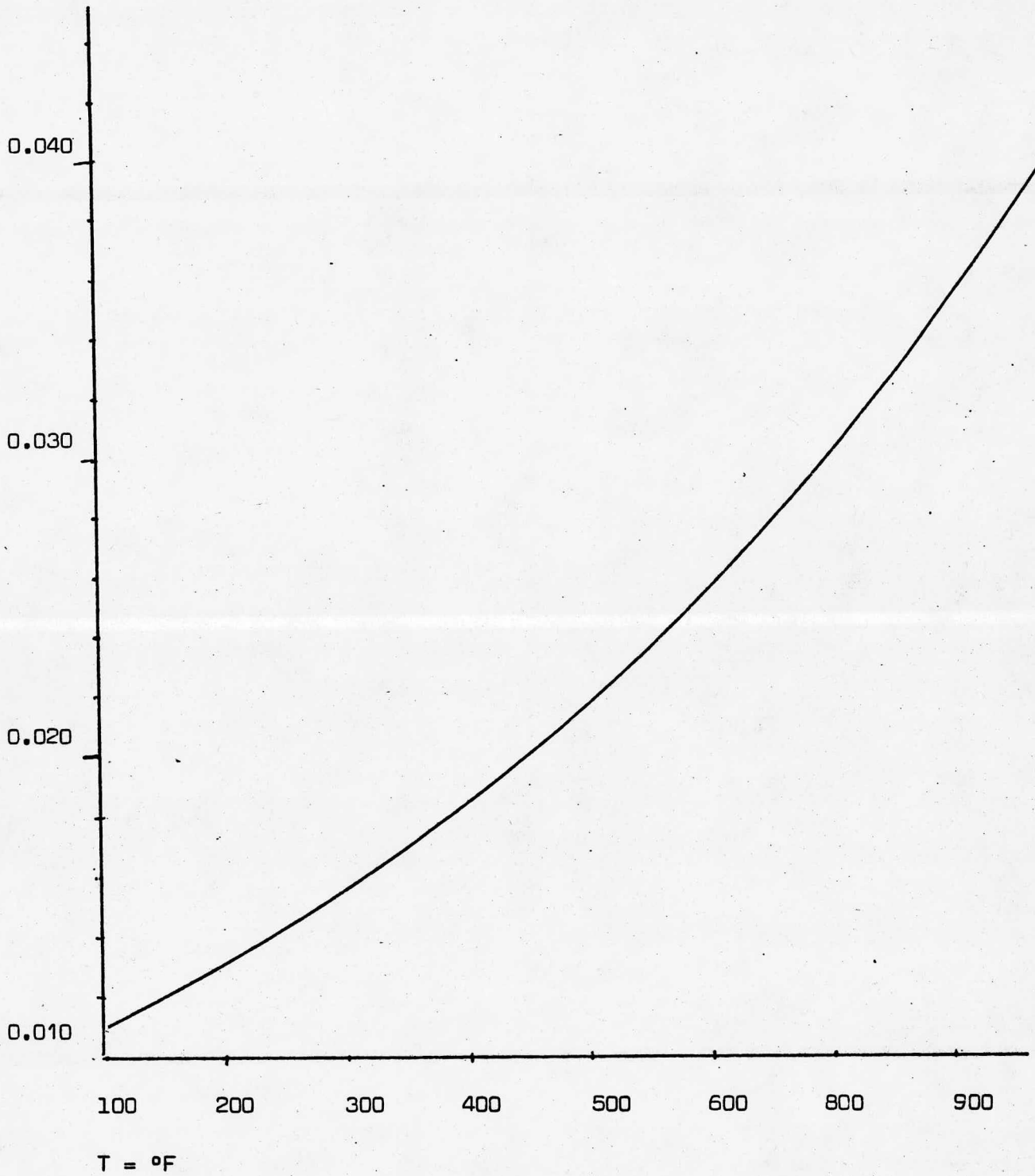
	Entrada	Salida
k_A	0.117	0.141
k_B	0.1705	0.1853
k_C	0.171	0.204
k_D	0.02195	0.0261

Para encontrar la conductividad térmica de las mezclas, se tiene la ecuación (3 - 80) P 3 - 226 Perry 4a. Edición.

$$\frac{Ni \ k_i \ (M_i)^{\frac{1}{2}}}{Ni \ (M_i)^{\frac{1}{3}}}$$

Conductividad térmica de vapor de agua contra temperatura

$$k = \text{Btu/h ft}^2 (\text{°F/ft})$$



Entrada (Datos tomados del cálculo de viscosidad) y $N_C = 0$
 y $N_D = 0$

$$k_1 = \frac{0.16667 \times 0.117 \times (123)^{\frac{1}{2}} + 0.833 \times 0.1705 (2)^{\frac{1}{2}}}{0.1667 \times (123)^{1/3} + 0.833 \times (2)^{1/3}}$$

$$= \frac{0.1667 \times 0.117 \times 11.1 + 0.833 \times 0.1705 \times 1.42}{0.1667 \times 4.974 + 0.833 \times 1.26}$$

$$k_1 = \frac{0.2164 + 0.2010}{0.8291 + 1.0499} = \frac{0.4174}{1.879} = 0.222$$

$$k_1 = 0.222$$

Salida

$$k_2 = \frac{0.057 \times 0.141 \times 11.1 + 0.547 \times 0.1853 \times 1.42 + 0.132 \times 0.204 \times 9.64 + 0.264 \times 0.0261 \times 4.25}{0.057 \times 4.974 + 0.547 \times 1.26 + 0.132 \times 4.535 + 0.264 \times 2.625}$$

$$= \frac{0.0892 + 0.1439 + 0.2595 + 0.02928}{0.2835 + 0.6892 + 0.5986 + 0.6930} = \frac{0.5218}{2.264}$$

$$k_2 = 0.2304$$

$$k_m = \frac{k_1 + k_2}{2} = 0.2262$$

d).- Estimación del coeficiente de transmisión de calor.-

Para los coeficientes individuales de transmisión de calor se tiene la siguiente expresión:

$$\frac{hiD}{K} = 0.027 \left(\frac{Dg}{\mu} \right)^{0.8} \left(\frac{C\mu}{k} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14} \quad (6.2)$$

Además se puede usar la Analogía de Colburn:

$$JH = \left(\frac{hiD}{k} \right) \left(\frac{C\mu}{k} \right)^{-1/3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{-0.14}$$

JH se lee en la fig. 24 del Ke \ddot{u} n - Process Heat Transfer, donde viene graficado JH contra número de Reynolds.

Finalmente se tiene:

$$hi = \left(\frac{k}{D} \right) \left(\frac{\mu C}{k} \right)^{+1/3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{+0.14} JH$$

Datos:

$$k_{\text{acero}} = 26 \text{ BTU/hr ft}^2 \text{ (}^\circ\text{F/ft)}$$

$$k = 0.2262 \text{ BTU/hr ft}^2 \text{ (}^\circ\text{F/ft)}$$

$$C_p = 0.581 \frac{\text{BTU}}{\text{lb}^\circ\text{F}}$$

$$D = 0.16715 \text{ ft}$$

$$D_o = 0.1979 \text{ ft}$$

$$\mu = 0.0128 \text{ ft}$$

$$\mu = 0.037 \frac{\text{lb}}{\text{ft-hr}}$$

$$\mu_w = 0.037 \frac{\text{lb}}{\text{ft-hr}}$$

$$h_o = 1500 \text{ BTU/hr (ft)}^2 (\text{°F})$$

$$D_m = 0.1847 \text{ ft}$$

$$L = 70 \text{ cm.} = 2.295 \text{ ft}$$

$$D = 0.16715 \text{ ft}$$

$$\rho_1 = 0.06157 \text{ lb/ft}^3 \text{ densidad a la entrada}$$

$$\rho_2 = 0.06157 \times \frac{1.56}{2} \times \frac{548}{623} = 0.0424$$

$$\rho_m = \frac{0.06157 + 0.0424}{2}$$

$$\rho_m = 0.05198 \text{ lb/ft}^3$$

Número de Reynolds

$$Re = \frac{G}{Av} \mu$$

$$Av = 120 \frac{\text{ft}^2}{\text{ft}^3}$$

$$\mu = 0.037 \frac{\text{lb}}{\text{ft-hr}}$$

Número de Prandlt.

$$Pr = \frac{C_p \mu}{k} = \frac{0.581 \text{ BTU/lb °F} \times 0.037 \text{ lb/ft-hr}}{0.2262 \text{ BTU/hr ft}^2 (\text{°F/ft})} = \frac{0.02149}{0.2262}$$

$$Pr = 0.095$$

$$Pr^{1/3} = 0.456$$

$$\frac{k}{b} (Pr)^{1/3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14} = \frac{0.2262}{0.16715} 0.456 \times 1 = 0.617$$

Un tubo con lecho empacado tiene variación con respecto a un tubo vacío y esto lo reporta Smith en la tabla 10 - 1 pag. 289 de su libro Chemical Engineering Kinetics.

$$dp/dt = 0.05 \quad \text{Condición más drástica}$$

$$hp/hi = 5.5 \quad \text{De donde}$$

$$hp = 5.5 hi$$

El coeficiente total está expresado por:

$$U = \frac{1}{\frac{1}{hp} + \frac{\psi}{k} \frac{Di}{Dm} + \frac{1}{ho} \frac{Di}{Do}}$$

$$ho = 1500 \text{ BTU/hr ft}^2 \text{ } ^\circ\text{F}$$

$$Di = 0.1675 \text{ ft}$$

$$Do = 0.1979 \text{ ft}$$

$$Dm = 0.1847 \text{ ft}$$

$$k_{\text{acero}} = 26 \text{ BTU/hr ft}^2 \text{ (} ^\circ\text{F/ft)}$$

$$\psi_{\text{acero}} = 0.1283 \text{ ft}$$

$$U = \frac{1}{\frac{1}{hp} + \frac{0.9128}{26} \times \frac{0.1675}{0.1847} + \frac{1}{ho} \frac{0.16975}{0.1979}}$$

$$U = \frac{1}{\frac{1}{hp} + 0.000443 + 0.8476 \frac{1}{ho}}$$

$$\frac{1}{U} = \frac{ho + 0.000443 hpho + 0.8476 hp}{ho hp}$$

$$U = \frac{h_o h_p}{h_o + 0.000443 h_p h_o + 0.8476 h_p}$$

Dado que

h_o es muy grande con respecto a h_p , el término

$$\frac{1}{k} \frac{D_i}{D_m}$$

o bien

$$\frac{e}{k} \frac{D_i}{D_m} h_p h_o$$

No afecta casi en la ecuación, por lo tanto, se desprecia el término, y queda:

$$U = \frac{h_p h_o}{h_p + h_o}$$

Donde:

$$U = \frac{\text{BTU}}{\text{hr ft}^2 \text{ } ^\circ\text{R}}$$

$$h = \frac{\text{BTU}}{\text{hr ft}^2 \text{ } ^\circ\text{R}}$$

$$\frac{\text{BTU}}{\text{hr ft}^2 \text{ } ^\circ\text{R}} = 0.488 \frac{\text{cal}}{\text{hr cm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}}$$

Tabla 3 - 1

V	G	Re	JH	hi	hp	ho x hp	U
25	77.97	17.56	1.60	0.98	5.39	8085	5.37
30	93.56	24.95	1.80	1.11	6.10	9150	6.07
50	155.94	35.12	2.10	1.29	7.09	10635	7.05
75	233.91	52.67	2.40	1.48	8.14	12210	8.10
100	311.68	70.19	2.60	1.60	8.80	13200	8.75
250	779.70	175.50	3.56	2.19	12.04	18060	11.94
500	1559.40	351.17	4.60	2.83	15.56	23340	15.40
750	2339.10	526.76	5.40	3.33	18.31	27465	18.90
1000	3118.80	702.35	6.10	3.76	20.68	31020	20.39

4.- DISEÑO DEL EQUIPO AUXILIAR DEL REACTOR.-

a).- Sistema de precalentamiento.-

Para llevar los reactivos a la temperatura de activación se requiere un sistema de transmisión de calor, para este fin se ha escogido una resistencia eléctrica introducida en una sección de tubo de reactor que expresamente se ha dejado con zona de precalentamiento. Esta resistencia será de alambre de nicrón enrollada sobre un cilindro de porcelana refractaria de 1/2 pulgada de diámetro.

1.- Calor requerido:

$$T_1 = 293 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$T_2 = 523 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$F = 6.905 \frac{\text{g mol Nb}}{\text{h}}$$

$$N_{\text{Nb}} = 0.8333$$

$$N_{\text{H}_2} = 0.1667$$

$$\Delta H_v = 79.08 \frac{\text{cal}}{\text{g}}$$

$$F_1 = 41.432 \frac{\text{g mol tot.}}{\text{h}}$$

$$C_{p_{\text{Nb}}} = 2.88 + 88.45 \times 10^{-3} T - 31.68 \times 10^{-6} T^2$$

$$C_{p_{\text{H}_2}} = 6.946 - 0.196 \times 10^{-3} T + 0.4757 \times 10^{-6} T^2$$

$$\Delta H_v^* = \Delta H_v \times F$$

$$\Delta H_v = 79.08 \frac{\text{cal}}{\text{gr}} \times 123 \frac{\text{gr}}{\text{g mol}} = 9726 \frac{\text{cal}}{\text{g mol}}$$

$$\Delta H_v^* = 9726 \frac{\text{cal}}{\text{g mol Nb}} \times 6.905 \frac{\text{g mol Nb}}{\text{h}}$$

$$\Delta H_v^* = 67.158 \frac{\text{cal}}{\text{h}}$$

ΔH_p = Calor molar requerido para precalentamiento

H = Entalpia a temperatura establecida

$$\Delta H_p = H_2 - H_1 = \int_{T_1}^{T_2} C_p dT = \int_{T_1}^{T_2} (a + bT + cT^2) dT$$

$$\Delta H_p = \left[aT + \frac{b}{2} T^2 + \frac{c}{3} T^3 \right]_{T_1}^{T_2}$$

$$C_{p_m} = 2.514 + 73.667 \times 10^{-3} T - 26.357 \times 10^{-6} T^2$$

$$\Delta H_p = \int_{293}^{523} [2.514 + 73.667 \times 10^{-3} T - 26.357 \times 10^{-6} T^2] dT$$

$$\Delta H_p = 6458.01 \frac{\text{cal}}{\text{g mol}}$$

$$F_1 = 41.432 \frac{\text{gr mol tot.}}{\text{h}}$$

$$Q_R^* = H_p F_1 = 6458.01 \times 41.43 = 267555.4 \frac{\text{cal}}{\text{h}}$$

$$Q_R = Q_R^* + H_v^* = 267555 + 67158$$

$$Q_R = 334713 \frac{\text{cal}}{\text{h}} = 334.713 \frac{\text{K cal}}{\text{h}}$$

2.- Cálculo de la resistencia:

$$P = I^2 \times R$$

$$R = \text{ohms.} = \frac{\text{volts}}{\text{amp}}$$

$$I = \text{amps.}$$

$$P = \frac{\text{volts}}{\text{amps.}} \times \text{amps.}^2 = \text{volts} \times \text{amps.} = \frac{\text{joul}}{\text{seg}}$$

$$1 \text{ cal} = 4.184 \frac{\text{joul}}{\text{seg}}$$

$$Q = \frac{\text{cal}}{\text{h}}$$

$$= 4.184 \frac{\text{joul}}{\text{segCd}} \times \frac{\text{cal}}{\text{h}} \times \frac{1\text{h}}{3600 \text{ seg}} = Q \times 41.84 \frac{\text{joul}}{\text{seg}} \times \frac{1\text{h}}{3600 \text{ se}}$$

$$R = \frac{4.184 Q}{3600 I^2}$$

$$P = 550 \text{ watts}$$

$$V = 110 \text{ volts}$$

$$I = \frac{P}{V} = \frac{550}{110} = 5 \text{ amps.}$$

$$R = \frac{4.184 Q}{3600 \times 25} = \frac{4.184}{90000} Q$$

$$R = 4.6489 \times 10^{-5} Q$$

$$Q = 334,713 \text{ cal}$$

$$R = 4.6489 \times 10^{-5} \times 334,713$$

$$R = 15.56$$

$$\rho = \rho_0 (1 + \alpha t)$$

Para alambre de nicrón:

$$\rho_0 = 100 \times 10^{-8} \Omega\text{-m}$$

$$\alpha = 0.0004$$

De donde:

$$\begin{aligned} &= 100 (1 + 0.0004 \times 250) \\ &= (100 \times 1.1) = 110 \times 10^{-8} \Omega\text{-m} \end{aligned}$$

El diseño es para las condiciones más extremas.

$L = 1 \text{ m}$	Longitud de calentamiento
$D_s = 1/2'' = 1.27 \text{ cm.}$	Diámetro del soporte
$L_v = 3.99 \text{ cm.}$	Longitud de vuelta
$N_v = \frac{L_c}{D_c}$	Número de vueltas
$L_c = N_v \times L_v$	Longitud conductor

$$R = 1 \times 10^{-4} \frac{L}{C} (\Omega - \text{cm}) =$$

	D	D ²	A (cm ²)	Nv	Lc(cm)	Lc/A(1/cm)	R
0000	11.68	136.42	1.0700	85.61	341.58	319.23	0.0319
0	8.25	68.06	0.5300	121.21	483.62	912.49	0.0912
10	2.59	6.70	0.0526	386.10	1540.53	29287.64	2.9287
12	2.05	4.20	0.0329	487.80	1946.32	59158.86	5.9158
14	1.63	2.66	0.0209	613.49	2447.82	117120.57	11.1200
16	1.29	1.66	0.0130	775.19	3093.00	237923.07	23.7920
18	1.02	1.04	0.0082	980.39	3911.75	477042.68	47.7042

El valor más cercano a 15.56 es 11.120, pero por razones de seguridad se escoge el superior inmediato 23.79

$$R = 15.56 \Omega \approx 16 \Omega$$

$$\frac{16}{23.79} = 0.6725$$

Usando el 67.25% de la longitud de conductor evaluada para un calibre de 16

$$L^*c = 3093 \times 0.6725 = 2080 \text{ cm} = 2080 \text{ m}$$

$$L^*c/A = 160000$$

$$R = 100 \times 10^{-6} L^*/A = 16 \Omega$$

3.- Especificaciones de la resistencia obtenida.

$$P = 550 \text{ watts} \quad \text{mínima}$$

$$V = 110 \text{ volts}$$

$$I = 5 \text{ amps. (de diseño)}$$

$$R = 16 \Omega$$

Calibre 16

$$L_c = 20.80 \text{ m.}$$

$$D_c = 1.29 \text{ mm.}$$

$$N_v = 521.30$$

Condiciones reales

$$I = \frac{V}{R} = \frac{110}{16} = 6.87 \text{ amps.}$$

$$P = RI^2 = 16 \times 47.19$$

$$P = 755 \text{ watts}$$

4.- Resistencia calentadora del catalizador

$$C_p = 0.25 \frac{\text{cal}}{\text{g}^\circ\text{L}} \quad \text{asbestos} \quad 3-133 \text{ Perry}$$

$$Q_A = W C_p (T_2 - T_1)$$

$$W = 1035.80 \text{ gramos catalizador}$$

Se considera para el cálculo composición de 100% de asbestos.

$$T_1 = 20 \text{ }^\circ\text{C} = 293 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$T_2 = 250.16 \text{ } ^\circ\text{C} = 523.36 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$Q_A = 1035.80 \times 0.25 (523.36 - 293) = 59599.93 \text{ cal}$$

Tiempo de calentamiento 0.25 hora

$$Q_A = \frac{59599.93 \text{ cal}}{0.25 \text{ h}} = 238997.20 \frac{\text{cal}}{\text{h}}$$

Tomando la ecuación del diseño de la resistencia precalentadora

$$R = 4.6489 \times 10^{-5} Q$$

l esp. = 5 amps.

$$R = 11.11 \Omega$$

Aproximando $R_D = 12 \Omega$ (diseño)

Siguiendo 1 criterio de la sección anterior

$$L = 0.70 \text{ m.}$$

$$D_s = 1.27 \text{ cm.}$$

$$L_v = 3.99 \text{ cm.}$$

Alambre calibre 16

$$D_c = 1.29 \text{ mm.}$$

$$D_2 = 1.66 \text{ mm.}^2$$

$$A_c = 0.0130 \text{ cm.}^2$$

$$N_v = 542.63$$

$$L_c = 542.63 \times 3.99 = 21.65 \text{ m.}$$



$$L_c/A = 166538.46$$

$$R = 16.65$$

$$\frac{R}{L} = \frac{R_d}{L_d} \cdot \cdot \cdot L_d = \frac{R_p \times L}{R}$$

$$L_d = \frac{12 \times 21.65}{16.65} = 15.60 \text{ m.}$$

Comprobación:

$$L/A = \frac{1560 \text{ cm.}}{0.0130 \text{ cm.}}^2 = 120000$$

$$R = 1 \times 10^{-4} \times 120000 = 12. \Omega$$

5.- Especificaciones de la resistencia obtenida:

$$R = 12 \Omega$$

Calibre 16

$$L_c = 15.60 \text{ m.}$$

$$V = 110 \text{ volts}$$

$$I = \frac{V}{R} = \frac{110}{112} = 9.16 \text{ amps.}$$

b).- Sistema de alimentación.-

$$V = 25 \text{ ft/min.} = 1500 \text{ ft/h}$$

$$\rho_m = 0.06557 \text{ lb/ft}^3$$

$$S_e = 0.02194 \text{ ft}^2$$

$$F_1 = \rho v s$$

$$F_1 = 0.06157 \times 25 \times 0.02193 \times 60$$

$$F_1 = 2.026 \text{ lb/h}$$

$$P.M. \text{ Mezcla} = 22.20$$

$$F_1 = 2.026 \frac{\text{lb}}{\text{h}} \times \frac{1}{22.20} \frac{\text{lb}}{\text{mol}} \times \frac{454 \text{ g mol}}{\text{lb mol}}$$

$$F_1 = 41.432 \frac{\text{g mol}}{\text{h}}$$

$$F = F_1 \frac{\text{g mol tot.}}{\text{h}} \times \frac{5 \text{ g mol } H_2}{6 \text{ g mol tot}} = 6.905 \frac{\text{g mol Nb}}{\text{h}}$$

$$FH_2 = F_1 \frac{\text{g mol}}{\text{h}} \times \frac{5 \text{ g mol } H_2}{6 \text{ g mol tot}} = 34.5266 \frac{\text{g mol } H_2}{\text{h}}$$

H_2 a condiciones standard:

$$34.5266 \times 22.4 = 773.397 \text{ lts. s. c.}$$

a

$$T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$P = 2 \text{ at}$$

$$773.397 \text{ lts.} \times \frac{293}{273} \times \frac{1}{2} = 415.335 \text{ lts.} / \frac{2 \text{ at}}{T = 293 \text{ }^\circ\text{K}}$$

$$\rho_{H_2}^{2 \text{ at}} = \frac{34.5266 \times 2}{415.335} = 0.166259 \frac{\text{g}}{\text{lt}}$$

Cálculo del diámetro del tubo de alimentación de Hidrógeno.-

$$T = 20 \text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$P = 2 \text{ at}$$

$$\rho = 0.166259 \text{ g/lt}$$

$$Q = 415.335 \text{ lts./h}$$

$$v = 25 \text{ lt/min.} \times 60 \text{ min./h} = 1500 \text{ ft/h}$$

$$FH_2 = 34.5266 \text{ g mol } H_2/h$$

$$FH_2 = 69.0532 \text{ g/h} \times 1 \text{ lb/454 g}$$

$$FH_2 = 0.152 \text{ lb/h}$$

$$FH_2 = vS$$

$$\rho_{H_2} = 0.166259 \text{ g/lt} \times 28.32 \text{ lts./ft}^3 \times 1 \text{ lb/454 g}$$

$$\rho_{H_2} = 0.010371 \text{ lb/ft}^3$$

$$S = \frac{F}{v} = \frac{0.152 \text{ lb/h}}{0.010371 \text{ lb/ft}^3 \times 1500 \text{ ft/h}}$$

$$S = 0.0097703 \text{ ft}^2$$

Corresponde al tubo de 1 1/4 de pulgada Cédula 40

Cálculo del diámetro del tubo de alimentación para Nb.

$$S_g = 1.205 \text{ lb/4}$$

$$\rho = 1.205 \times 62.44 = 75.24 \text{ lb/ft}^3$$

$$v = 1500 \text{ ft/h}$$

$$F = 849.31 \text{ g/h} \times 1 \text{ lb/454 g} = 1.8707 \text{ lb/h}$$

$$S = \frac{1.8707 \text{ lb/h}}{75.24 \text{ lb/ft}^3 \times 1500} = 0.003358 \text{ ft}^2$$

Corresponde a un tubo de 3/4 Sch. 40

Tanque de almacén Nb

Tiempo de servicio = 1 semana

1 semana = 6 días

1 día = 8 horas de operación

Tiempo de operación = 8 horas

Flujo de operación = F

F = 849.315 g/h = 0.849315 Kg/h

$\rho = 1.205 \text{ Kg/lt} = 75.24 \text{ lb/ft}^3$

Q = 0.849 315 Kg/h $\times \frac{1}{1.205} \text{ lt/Kg} = 0.7048 \text{ lts./h}$

Tiempo de servicio = 8 x 6 = 48 horas

Factor de tolerancia 1.2

Tiempo de servicio considerado = 48 x 1.2 = 57.6 horas

Tsc \approx 60 horas

Volúmen del tanque = 60 x 0.7048 = 42.288 lts.

Diseño del tanque almacén.-

$$v = \frac{\pi}{4} D^2 h$$

$$v = 50 \text{ lts.} = 0.050 \text{ m}^3$$

h = variable

$$D^2 = \frac{4 v}{\pi \times h} = \frac{0.050 \times 4}{3.1416 \times h} = \frac{0.06366}{h}$$

Selección de las dimensiones más funcionales.

No.	h	D ²	D
1	0.50	0.12670	0.35590
2	0.60	0.10560	0.32496
3	0.75	0.08448	0.29070
4	0.80	0.07920	0.28140
5	0.90	0.07040	0.26530
6	1.00	0.06366	0.25230

Las dimensiones más convenientes son las del tanteo No. 3
las cuales se redondean a:

$$h = 75$$

$$D = 0.30 \text{ m.}$$

Dando un volumen de:

$$v = 52.98 \text{ lts.}$$

Tanque amortiguador:

$$D = 20.32 \text{ cm.} = 8 \text{ pulgadas} \quad D^2 = 0.04129$$

$$\text{Volúmen de líquido} = 10 \text{ lts.} = V_L$$

$$V_L = 10 \text{ lts.}$$

$$h = 0.75$$

$$V_T = 0.0243 \text{ m}^3 = 243 \text{ lts.}$$

$$V_T = V_L + V_A$$

$$V_A = V_T - V_L = 24.3 - 10 = 14.3 \text{ lts.}$$

h_L = Altura hidrostática del líquido

$$v = 0.785 \times D^2 \times h$$

$$h = \frac{v}{0.785 \times D^2} = \frac{.010}{0.785 \times 0.04129} = \frac{0.010}{0.03241} = 0.30.85$$

$$h_L = 30.85 \text{ cm.}$$

Para neutralizar la altura hidrostática del tanque amortiguador, el reactor debe colocarse 30.85 cm. arriba de la base del primero.

5.- DATOS ALIMENTADOS A LA COMPUTADORA.

a).- Criterio seguido.

Una vez determinado el sistema de integración, se procedió al cálculo de cada una de las constantes y propiedades involucradas en el sistema, y se elaboró un programa para resolverlo en la computadora de la Facultad de Química. Para el sistema de integración se escogió el método de integración numérica de Runge Kutta, y una vez terminado el programa, se adecuaron todas las unidades para hacerlas dimensionalmente congruentes, se escogió como velocidad de alimentación de partida 3 ft/min y se calcularon todas las constantes y propiedades necesarias, algunas de las cuales se encuentran en las tablas que vienen a lo largo del apéndice, y en el caso de propiedades variables en función de las muchas variables que se manejaron en este cálculo, la computadora fue alimentada con las ecuaciones y las funciones debidas para que elaborara esos cálculos en cada uno de los tanteos realizados.

Los tanteos se realizaron de la siguiente manera:

- 1).- Se fijó la velocidad de alimentación
 - 2).- Se supuso la temperatura de enfriamiento.
 - 3).- Se optimizaron los resultados y se obtuvo como velocidad de alimentación óptima 25 ft/min.
 - 4).- Con una velocidad óptima de 25 ft/min, se procedió a variar la temperatura de enfriamiento haciendo múltiples tanteos hasta que se llegó al resultado que se muestra en la página 26 el cual fue el mejor de todos los que se intentaron.
- b).- Resumen y nomenclatura de los datos alimentados a la computadora.

T_o = Temperatura inicial ° K

P_o = Presión inicial atmosferas.

T_e = Temperatura enfriamiento ° K

ρ_a = Densidad de la mezcla de alimentación gramos/cm³

- ρ_m = Densidad media de la mezcla gr/cm³
 ρ_{ap} = Densidad aparente del lecho catalítico. gr/cm³
 ρ_p = Densidad media de las partículas gr/cm³
 S = Area sección del reactor. cm²
 D_t = Diametro tubo. cm.
 α_v = Superficie de partículas de catalizador por unidad de volumen
 cm²/cm³
 F = Alimentación Gr mol Nb alim./ hora.
 G = Masa velocidad lb ft²/h
 F_d = Fracción de espacio ocupado por las partículas en el lecho, adim.
 V = Velocidad ft/min.

Para efectuar cada aproximación se calcularon, sacaron de graficas o se estimaron por diferentes metodos cada uno de los datos enlistados y se corrió el programa en la computadora obteniéndose un enlistado para cada tanteo efectuado.

c).- Enlistado del programa.-

Como mera ilustración a continuación se reproduce el enlistado del programa que se uso para resolver este calculo.

Agradezco la Colaboración del Ing. Alejandro Medina quien elaboró el programa, y al centro de calculo de la Facultad de Quimica, todas las facilidades que se me brindaron.

Este trabajo fue realizado en el mes de mayo de 1968.

La principal fuente de información fue proporcionada por la Biblioteca de La Facultad de Quimica.

También se recopilaron datos y se consultaron algunas referencias en la Biblioteca de facultad de Ciencias de La U. N. A. M.

ENLISTADO DEL PROGRAMA.

6056

REACTOR TUBULAR DE ANILINA
 TESIS PROFESIONAL DE JUSTINO FERNANDEZ
 DIMENSION X%70],T%70],PI%70],AL%70]

TYPE 4323

TYPE 10

TYPE 20

READ 30,TEMP,PRES,TENF

READ 40,ROA,ROM,ROAP,ROP

READ 50,S,D,AV,F,G,FD,U

READ 60,DL

DO 807 I#1,70

X%I]#0.

AL%I]#0.

PI%I]#0.

807 T%I]#0.

333 I#1

TYPE 100,AL%I],X%I],TEMP,PRES

T%I]#TEMP

PI%I]#PRES

000 AK1#0.

AK2#0.

AK3#0.

AK4#0.

AM1#0.

AM2#0.

444 AM3#0.

AM4#0.

AN1#0.

AN2#0.

AN3#0.

AN4#0.

AKC#0.

V#0.

555 A#4.104E 04

EXPO1#-8240./T%I]

AKC#A*EXPF%EXPO1]

V#ROA*S*AKC/F

AK1#V*SQRTF%1.-X%I]]*SQRTF%5.-3.*X%I]]*PI%I]*DL/%6.-X%I]]

CPA#2.8880.08845*T%I]-31.68E-06*T%I]**2

CPB#6.946-0.196E-03*T%I]&0.4757E-06*T%I]**2

CPC#-2.168100.66E-03*T%I]-39.81E-06*T%I]**2

CPD#7.136&2.64E-03*T%I]&0.0459E-06*T%I]**2

DHR#-108961.-15.04*T%I]&0.01725*T%I]**2-1.127E-05*T%I]**3&3.00E-09

1*T%I]**4

CARE#F%-DHR]*AK1/DL

CALOR#3.1416*U*D*T%I]-TENF]

RECA#F*AK1*CPA&3.*CPB-CPC-2.*CPD]*T%I]-TEMP]/DL

CALSE#F*CPA*%1.-X%I]]&CPB*%5.-3.*X%I]]&CPC*X%I]]&2.*CPD*X%I]]

AM1#%CARE-CALOR&RECA]*DL/CALSE

AN1#7.42E-14*G*G*AV*FD/%ROM*%1.-ROAP/ROP]**1.7]

EXPO2#-8240./T%I]]&AM1/2.]

AKC#A*EXPF%EXPO2]

V#ROA*S*AKC/F

AK2#V*SQRTF%1.-X%I]-AK1/2.]*SQRTF%5.-3.*X%I]]&AK1/2.]]*%PI%I]-AN1/

12.]*DL/%6.-X%I]-AK1/2.]

CPA#2.8880.08845*T%I]]&AM1/2.]-31.68E-06*T%I]]&AM1/2.]]**2

CPB#6.946-0.196E-03*%T%I]&AM1/2.]&0.4757E-06*%T%I]&AM1/2.]**2
 CPC#-2.16&100.66E-03*%T%I]&AM1/2.]&39.81E-06*%T%I]&AM1/2.]**2
 8888 CPD#7.136&2.64E-03*%T%I]&AM1/2.]&0.0459E-06*%T%I]&AM1/2.]**2
 DHR#-108961.-15.04*%T%I]&AM1/2.]&0.01725*%T%I]&AM1/2.]**2-1.127E-5
 1*%T%I]&AM1/2.]**3&3.0E-09*%T%I]&AM1/2.]**4
 CARE#F*%-DHRJ*AK2/DL
 CALOR#3.1416*U*D*%T%I]&AM1/2.-TENFJ
 RECA#F*AK2*%CPA&3.*CPB-CPC-2.*CPD]*%T%I]&AM1/2.-TEMPJ/DL
 CALSE#F*%CPA*%1.-X%I]-AK1/2.]&CPB*%5.-3.*%X%I]&AK1/2.]&CPC*%X%I]&
 1AK1/2.]&CPD*%X%I]&AK1/2.]*2.]
 AM2#%CARE-CALOR&RECA]*DL/CALSE
 AN2#AN1
 EXPO3#-8240./%T%I]&AM2/2.]
 AKC#A*EXPF%EXPO3]
 9999 V#ROA*S*AKC/F
 AK3#V*SQRTF%1.-X%I]-AK2/2.]*SQRTF%5.-3.*%X%I]&AK2/2.]**%PI%I]-AN2/
 12.]*DL/%6.-X%I]-AK2/2.]
 CPA#2.88&0.08845*%T%I]&AM2/2.]-31.68E-06*%T%I]&AM2/2.]**2
 CPB#6.946&0.196E-03*%T%I]&AM2/2.]-0.4757E-06*%T%I]&AM2/2.]**2
 CPC#-2.16&100.66E-03*%T%I]&AM2/2.]&39.81E-06*%T%I]&AM2/2.]**2
 CPD#7.136&2.64E-03*%T%I]&AM2/2.]&0.0459E-06*%T%I]&AM2/2.]**2
 DHR#-108961.-15.04*%T%I]&AM2/2.]&0.01725*%T%I]&AM2/2.]**2-1.127E-5
 1*%T%I]&AM2/2.]**3&3.0E-09*%T%I]&AM2/2.]**4
 CARE#F*%-DHRJ*AK3/DL
 CALOR#3.1416*U*D*%T%I]&AM2/2.-TENFJ
 RECA#F*AK3*%CPA&3.*CPB-CPC-2.*CPD]*%T%I]&AM2/2.-TEMPJ/DL
 CALSE#F*%CPA*%1.-X%I]-AK2/2.]&CPB*%5.-3.*%X%I]&AK2/2.]&CPC*%X%I]&
 1AK2/2.]&CPD*%X%I]&AK2/2.]*2.]
 AM3#%CARE-CALOR&RECA]*DL/CALSE
 AN3#AN2
 EXPO4#-8240./%T%I]&AM3]
 AKC#A*EXPF%EXPO4]
 V#ROA*S*AKC/F
 AK4#V*SQRTF%1.-X%I]-AK3]*SQRTF%5.-3.*%X%I]&AK3]**%PI%I]-AN3]*DL/
 16.-X%I]-AK3]
 CPA#2.88&0.08845*%T%I]&AM3]-31.68E-06*%T%I]&AM3]**2
 CPB#6.946&0.196E-03*%T%I]&AM3]-0.4757E-06*%T%I]&AM3]**2
 CPC#-2.16&100.66E-03*%T%I]&AM3]&39.81E-06*%T%I]&AM3]**2
 CPD#7.136&2.64E-03*%T%I]&AM3]&0.459E-06*%T%I]&AM3]**2
 DHR#-108961.-15.04*%T%I]&AM3]&0.01725*%T%I]&AM3]**2-1.127E-05*%T%I
 1]&AM3]**3&3.0E-09*%T%I]&AM3]**4
 CARE#F*%-DHRJ*AK4/DL
 CALOR#3.1416*U*D*%T%I]&AM3-TENFJ
 RECA#F*AK4*%CPA&3.*CPB-CPC-2.*CPD]*%T%I]&AM3-TEMPJ/DL
 CALSE#F*%CPA*%1.-X%I]-AK3]&CPB*%5.-3.*%X%I]&AK3]**&CPC*%X%I]&AK3]&
 1CPD*%X%I]&AK3]**2.]
 AM4#%CARE-CALOR&RECA]*DL/CALSE
 AN4#AN3
 HINCX#%AK1&2.*AK2&2.*AK3&AK4]/6.
 HINCT#%AM1&2.*AM2&2.*AM3&AM4]/6.
 HINCPC#%AN1&2.*AN2&2.*AN3&AN4]/6.
 719 X%I&1]#X%I]&HINCX
 T%I&1]#T%I]&HINCT
 PI%I&1]#PI%I]&HINCPC
 AL%I&1]#AL%I]&DL
 TYPE 100.AL%I&1],X%I&1],T%I&1],PI%I&1]
 N#I&1

```

IF%ALXN]-70.]1000,2000,2000
1000 IF%SENSE SWITCH 2]4000,5000
4000 I#I&1
GO TO 3000
5000 TENF#0.0
READ 1122,TENF
GO TO 4000
2000 QT#F*X%I&1]*%-129160.&11.606*T%I&1]-845.E-03*T%I&1]**2&3.16E-06*T%
1I&1]**3]
TYPE 300,X%I&1]
TYPE 400,QT
10 FORMAT%/76H]CALCULO DE LA CONVERSION LOGRADA EN UN REACTOR CATALITI
1CO DE 70 CM. DE LARGO]
20 FORMAT%///46H]LONGITUD CONVERSION TEMPERATURA PRESION]
30 FORMAT%F7.2,2X,F6.2,2X,F7.2]
40 FORMAT%4%F8.4,2X]]
50 FORMAT%F8.4,2X,F7.4,2X,F6.2,E11.4,2X,E11.4,2X,F6.4,2X,F8.3]
60 FORMAT%F5.2]
100 FORMAT%1X,F6.2,6X,F6.4,6X,F9.2,4X,F8.5]
200 FORMAT%///80H]ÑÑ*/*%]-#ÑQUE CARAI, LA TEMPERATURA PASA DE 350 GRADO
1S, HAY QUE CAMBIAR PROGRAMA]
300 FORMAT%///43H]LA CONVERSION LOGRADA EN ESTE REACTOR ES ,F6.4,2X,
124H]MOLES POR MOL ALIMENTADA]
400 FORMAT%2X,37H]CON UN DESPRENDIMIENTO DE CALOR DE ,E11.4,17H CALO
1RIAS / HORA]
1122 FORMAT%F10.0]
4323 FORMAT%//10X,38H]TESIS PROFESIONAL DE JUSTINO FERNANDEZ]
6000 PAUSE
END

```