



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
ZARAGOZA**

**“ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LA
TRANSFERENCIA DE MASA CON REACCIÓN
QUÍMICA EN UNA TORRE DE ABSORCIÓN
CASO MONOETANOLAMINA-CO₂”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A:

KARO GUADALUPE GUERRERO RUÍZ

DIRECTOR:

DR. MARIANO PÉREZ CAMACHO



CIUDAD DE MÉXICO 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

AGRADECIMIENTOS

Primeramente quiero agradecer a Dios y a la Virgen de Guadalupe por la vida, por permitirme llegar hasta este momento tan importante en mi formación académica.

A la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza-UNAM por abrirme las puertas y convertirse en mi segundo hogar, por darme las bases necesarias para cumplir esta meta, por los momentos inolvidables donde conocí a gente extraordinaria, amigos que llevo en el corazón y grandes maestros que me inspiraron en cada una de sus clases.

A mi director de tesis el Doctor Mariano Pérez Camacho, fue un placer trabajar con usted, gracias por su apoyo que ha sido fundamental para la realización de este trabajo, gracias por ser un gran maestro y creer en mí, por guiarme en el desarrollo de esta tesis y por compartir sus conocimientos, por su tiempo brindado, sus consejos y por las aportaciones a este trabajo.

A mi presidente de tesis el Dr. Etdson Emilio por ser un gran maestro e inspirar a muchos de nosotros a ser mejor persona y salir adelante, por sus consejos y su tiempo.

A mis demás sinodales: M. en I. Elisa Blanca Viñas Reyes, Dr. Blanca Estela García Rojas y M. en I. Francisco Javier Almazán Ruíz, gracias por todas sus aportaciones a mi trabajo y por su tiempo dedicado.

Al proyecto UNAM-DGAPA-PAPIME PE105319, por la beca otorgada para el desarrollo de esta investigación.

DEDICATORIAS

Dedico esta tesis a todos aquellos que creyeron en mí y estuvieron siempre presentes especialmente:

A mis queridos padres Cristina Angélica Ruíz H. y José Luis Guerrero G., cada que sentía que no podía pensar en ustedes, quiero decirles que son mi motivación día a día, los pilares de mi vida y hoy quiero darles las gracias por su amor, confianza, apoyo, trabajo y sacrificio brindado en todos estos años, gracias a ustedes soy una persona de bien y he llegado hasta aquí.

A mis hermanos Leslie Mar y José Manuel, por ser mi inspiración, gracias por estar siempre presentes, por todo el amor y el apoyo que me brindaron en esta etapa de mi vida.

A Iker V. Guerrero mi sobrino querido, por ser el motivo para ser mejor persona y lograr mis metas, te amo.

A Carolina Ruíz mi querida abuelita, un ser humano hermoso que está siempre presente. Gracias por creer en mí, por todo el apoyo, por todo el amor y el cariño brindado. A la familia Ruíz Hernández, gracias por por el cariño y el amor que me han demostrado.

A mis primos Carlos, Andrea y Camila, ya que son unos de mis motivos para seguir superándome y no rendirme. A mis primas Judith y Claudia por todo el cariño y el apoyo que desde pequeña me dieron.

A la familia Mosso Guerrero que forman parte de este logro, al abrirme las puertas de su hogar en una etapa muy importante en mi vida, por sus consejos, el cariño brindado, gracias a mi prima Itzel Mosso por estar siempre presente y apoyarme.

A mis amigas Diana, Jacquiline y Paloma, mis amigas del alma quienes me enseñaron el valor de la amistad, y aunque la distancia nos separe siempre están presentes.

A mi querida amiga Alma Luz quien siempre está ahí cuando la necesito, con quien he compartido muchos momentos de alegría pero también de tristeza, gracias, por tu amistad sincera, por motivarme siempre y creer en mí, por acompañarme en mis locuras y en los momentos más difíciles. Espero que nuestra amistad perdure por siempre.

A Carlos Tejada quien ha sido mi compañero durante los últimos años de mi formación profesional. Este proyecto no fue fácil pero estuviste motivándome y ayudándome para poder lograrlo. Gracias... por formar parte de mi vida, por acompañarme en mis locuras y siempre saber sacarme una sonrisa, por los buenos y malos momentos, por el amor, el cariño, los consejos y tu apoyo incondicional.

A mi amigo Alejandro, una persona admirable con quien he compartido gratos momentos a lo largo de esta etapa, gracias por estar siempre y ser un gran amigo.

A mi amigo Ulises, por todo el apoyo brindado, por los buenos y malos momentos que pasamos juntos, gracias por todo. A mis amigos Fernando, Daniel y Karina quienes fueron mis primeros amigos en la FES-Z gracias por tan agradables momentos y hacerme sentir en casa.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE TABLAS E IMÁGENES	5
SIMBOLOGÍA	7
INTRODUCCIÓN	10
MOTIVACIÓN	10
OBJETIVO	10
CAPÍTULO 1. FUNDAMENTOS	11
1.1 CONCEPTO DE TRANSFERENCIA DE MASA	11
Convectiva:.....	11
Difusiva:.....	11
1.2 LEY DE FICK	11
1.3 ABSORCIÓN	14
1.4 CONTRADIFUSIÓN	16
Contradifusión equimolar	16
Contradifusión no equimolar	17
1.5 TRANSFERENCIA DE MASA A TRAVÉS DE UN MEDIO ESTANCADO	18
1.6 CONCEPTO DE COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA	20
CAPÍTULO 2. GENERALIDADES	22
2.0 FUNDAMENTOS DE LA TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL	22
2.1 POSTULADOS DE LA TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL	23
2.1.1 TEORÍA DE LA DOBLE PELÍCULA	23
2.1.2 TEORÍA DE LA PENETRACIÓN	25
2.1.3 TEORÍA DE LA RENOVACIÓN DE LA SUPERFICIE	27
2.2.1 TEORÍA DE LA DOBLE PELÍCULA CON REACCIÓN QUÍMICA	29
2.2.3 CONCEPTO DE FACTOR DE MEJORA E	31
2.2.3 TIPOS DE REACCIÓN INTERFACIAL EXISTENTES.....	33
CASO A: REACCIÓN INSTANTÁNEA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA CON C _A ALTO	33
CASO B: REACCIÓN INSTANTÁNEA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA CON C _B ALTO	35

CASO C: REACCIÓN RÁPIDA CON C_B BAJO	36
CASO D: REACCIÓN RÁPIDA CON C_B ALTO, POR TANTO UNA REACCIÓN DE PSEUDO PRIMER ÓRDEN	37
CASO E Y F: VELOCIDAD INTERMEDIA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA	38
CASO G: REACCIÓN LENTA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA	39
CASO H: REACCIÓN INFINITAMENTE LENTA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA	40
2.3 CINÉTICA DE LA REACCIÓN GAS-LÍQUIDO CASO: MONOETANOLAMINA- CO₂	40
2.3.1 GRAFICA VAN- KREVELEN	44
2.4 MODELO DE TRANSFERENCIA DE MASA PROPUESTO: TRANSFERENCIA DE MASA CON REACCIÓN QUÍMICA EN UNA TORRE DE ABSORCIÓN CASO MONOETANOLAMINA-CO₂	46
Balance de masa en el volumen de control	49
2.4.2 SOLUCIÓN DEL MODELO	50
CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA DE ANALISIS PROPUESTA	52
DIAGRAMA DE BLOQUES PARA EL CÁLCULO DE LA ALTURA DE UNA TORRE DE ABSORCIÓN CON LA METODOLOGIA PROPUESTA	71
CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y CONCLUSIONES	72
BIBLIOGRAFÍA	77
APÉNDICE A	78
APÉNDICE B	80
APÉNDICE C	84
APÉNDICE D	85
APÉNDICE E	87
APÉNDICE F	91

ÍNDICE DE TABLAS E IMÁGENES

<i>Imagen 1. Movimiento de masa por difusión a través de un tubo capilar que está conectado a dos recipientes de oxígeno y nitrógeno.</i> _____	12
<i>Imagen 2. Difusión del soluto A en B con una longitud total L</i> _____	13

<i>Imagen 3. Fenómeno de absorción Gas-Líquido.</i>	14
<i>Imagen 4. Torre empacada de absorción</i>	15
<i>Imagen 5. . Difusión de A a través de una película estancada. La grafica muestra los perfiles de concentración los cuales son desviados de las líneas rectas debido a la contribución de la convección a la densidad de flujo de masa.</i>	18
<i>Imagen 6. Concepto de coeficientes de transferencia de masa; donde se pone en contacto un sólido A con un líquido y esta es agitado.</i>	20
<i>Imagen 7. Transferencia de masa interfacial gas-líquido</i>	22
<i>Imagen 8. Modelo de la doble película para el caso de una absorción gas-líquido.</i>	23
<i>Imagen 9. Modelo de la teoría de la penetración</i>	26
<i>Imagen 10. Modelo de la doble película en presencia de una reacción química.</i>	29
<i>Imagen 11. Difusión a través de una película donde hay una reacción homogénea.</i>	31
<i>Imagen 12. Caso A. Reacción instantánea con CA alto, con resistencias gas-líquido presentes</i>	34
<i>Imagen 13. Caso B. Reacción instantánea con CB alto, con resistencias gas-líquido presentes</i>	35
<i>Imagen 14. Caso C. Reacción rápida con CB bajo</i>	36
<i>Imagen 15. . Caso D. Reacción rápida con CB alto, por tanto, cinética de pseudo primer orden con respecto a A.</i>	37
<i>Imagen 16. Caso E y F. Velocidad intermedia con respecto a la transferencia de masa.</i>	38
<i>Imagen 17. Caso G. Reacción lenta con respecto a la transferencia de masa</i>	39
<i>Imagen 18. Caso G. Reacción infinitamente lenta.</i>	40
<i>Imagen 19. Grafica de Van Krevelens y Hoftijzer en la que se ha representado el Factor de mejora vs No. de Hatta para una reacción de segundo orden.</i>	45
<i>Imagen 20. Sistema de absorción con reacción química.</i>	46
<i>Imagen 21. Columna de absorción empacada.</i>	53
<i>Imagen 22. Difusividad de aminas en agua a 25°C</i>	55
<i>Imagen 23. Difusividad de CO₂ en agua a diferentes temperaturas</i>	55
<i>Imagen 24. Método de conversión de flujos obtenidos del rotámetro.</i>	56
<i>Tabla 1. Valores de la constante de reacción KAM a 25°C para diferentes aminas en contacto con CO₂</i>	43
<i>Tabla 2. Características de la torre en la que se llevó a cabo la experimentación</i>	53
<i>Tabla 3. Condiciones de entrada y salida de la MEA.</i>	53
<i>Tabla 4. Datos experimentales. Nota: los datos del flujo alimentado del aire y CO₂ se obtuvieron del rotámetro</i>	54
<i>Tabla 5. Difusividad de la MEA y el CO₂ a diferente temperatura</i>	55

Tabla 6. Resultados obtenidos a partir de la metodología propuesta _____ 70

Gráfica 1. Representación gráfica del comportamiento del flux de transferencia de masa del CO₂ a diferentes flujos de alimentación de monoetanolamina. _____ 72

Gráfica 2. Representación gráfica del comportamiento del Factor de mejora a lo largo de la columna de absorción, a diferentes flujos. _____ 74

Gráfica 3. Representación gráfica del comportamiento de la resistencia gaseosa a diferentes flujos de alimentación. _____ 75

Gráfica 4. Representación gráfica del comportamiento de la resistencia liquida a diferentes flujos de alimentación _____ 75

SIMBOLOGÍA

MEA: Monoetanolamina

A, B: Especies químicas

$A_{columna}$: Área interna de la columna cm^2

[A]: Concentración de CO₂ en la fase líquida $\left(\frac{gmolCO_2}{L}\right)$

a : Área interfacial efectiva por unidad de volumen empaquetado $\left(\frac{cm^2}{cm^3}\right)$

at : Área de la superficie total de empaque por unidad de volumen empaquetado $\left(\frac{cm^2}{cm^3}\right)$

[B]: Concentración de monoetanolamina $\left(\frac{gmolMEA}{L}\right)$

$[B]_{domo}$: Concentración de la monoetanolamina en el domo de la columna $\left(\frac{gmolMEA}{cm^3}\right)$

$[B]_{fondo}$: Concentración de la monoetanolamina en el fondo de la columna $\left(\frac{gmolMEA}{cm^3}\right)$

D_{AB} : Coeficiente de difusión de un componente A en una solución B $\left(\frac{cm^2}{s}\right)$

E : Factor de mejora

E_i : Factor de mejora para una reacción infinitamente rápida

G : Masa velocidad del gas $\left(\frac{gmol}{s}\right)$

g : Aceleración de la gravedad $\left(\frac{cm}{s^2}\right)$

H : Altura de la torre cm

H_e : Constante de Henry $\left(\frac{cm^3 atm}{gmolCO_2}\right)$

J_A : Flux difusivo de la especie A $\left(\frac{gmolA}{cm^2 s}\right)$

k_L : Coeficiente volumétrico individual en el lado del líquido $\left(\frac{1}{s}\right)$

k_G a : Coeficiente volumétrico individual en el lado de la fase gaseosa $\left(\frac{gmolCO_2}{s cm^3 atm}\right)$

k_2 : Constante de velocidad de reacción de segundo orden $\left(\frac{L}{gmols}\right)$

K_c : Constante de equilibrio $\left(\frac{gmol}{L}\right)$

K_{AM} : Constante de reacción para anima $\left(\frac{L}{gmol s}\right)$

L : Velocidad de masa de la corriente líquida $\left(\frac{g}{cm^2 s}\right)$

\sqrt{M} : Módulo de Hatta

N_{Az} : Flux molar del componente A.

$P_{op.}$: Presión de operación atm

p_{CO_2} : Presión parcial del CO₂ en el punto seleccionado *atm*

PM_{CO_2} : Peso molecular del CO₂ $\left(\frac{g}{mol}\right)$

PM_{Aire} : Peso molecular del aire $\left(\frac{g}{mol}\right)$

R_A : Velocidad de absorción con reacción química $\left(\frac{gmolA}{s\ cm^2}\right)$

t : Tiempo (s)

z : Coeficiente estequiométrico entre el dióxido de carbono y la monoetanolamina con un valor de 2.

ε : Fracción de huecos en la columna de absorción.

σ_L : Tensión superficial del líquido $\left(\frac{dinas}{cm}\right)$

σ_C : Tensión superficial crítica $\left(\frac{dinas}{cm}\right)$

μ_L : Viscosidad del líquido $\left(\frac{g}{cm\ s}\right)$

ρ_L : Densidad del líquido $\left(\frac{g}{cm^3}\right)$

ρ_G : Densidad del gas $\left(\frac{g}{cm^3}\right)$

INTRODUCCIÓN

Los procesos de tratamiento de gas son muy utilizados en la industria para remover impurezas de gas natural o de refinerías que se consideran contaminantes. En su mayoría, los procesos actuales están diseñados para eliminar impurezas de sulfuro de hidrogeno, por ser un compuesto altamente toxico y peligroso para el ser humano, y de dióxido de carbono (CO₂), por reducir a capacidad del gas de utilizarse como fuente de energía.

Este trabajo muestra un enfoque experimental aplicado al laboratorio para nutrir la enseñanza, en el cual se ha estudiado la absorción del dióxido de carbono mediante disoluciones acuosas en este caso, MEA (monoetanolamina).

MOTIVACIÓN

Este trabajo está orientado para que posteriormente sirva de apoyo a la materia de transferencia de masa con una práctica experimental que se describe a lo largo de este trabajo. Se le debe de plantear al alumno una problemática; sabemos que el agua es poco capaz de disolver CO₂, para esto se propone preparar una solución de 15% peso de monoetanolamina-agua (MEA-H₂O), que será alimentado a la torre de absorción a diferentes flujos, la mezcla gaseosa estará compuesta por aire-CO₂.

OBJETIVO

Que el alumno se percate mediante la experimentación del efecto de la competencia entre el tiempo de residencia, la difusión y la reacción en la dinámica de transferencia de masa interfacial con reacción química que se presenta durante la reacción monoetanolamina-CO₂ en un reactor absorbedor.

CAPÍTULO 1. FUNDAMENTOS

1.1 CONCEPTO DE TRANSFERENCIA DE MASA

Una de las principales características de la ingeniería química y de disciplinas afines como la ingeniería bioquímica y de alimentos, es que ocupan de la transformación de materiales en otros diferentes con propiedades que resultan de utilidad. Para ello son necesarias las reacciones químicas y las separaciones de materiales que están mezclados para obtener productos con diversas propiedades y grados de pureza.

El transporte de masa puede ocurrir por dos mecanismos diferentes: difusión y convección.

Convectiva: El transporte de masa debido a la convección es un proceso macroscópico que consiste en el movimiento intensivo de un fluido. Fundamentalmente se lleva a cabo por una diferencia de densidades, que surge como resultados de una diferencia de concentraciones altas.

Difusiva: La difusión molecular o transporte de molecular de masa, es el fenómeno en el cual las moléculas de un compuesto se mueven aleatoriamente debido a un gradiente; de concentración y de temperatura. La velocidad de las moléculas depende principalmente de la temperatura; cuanto mayor sea está, más grande será la velocidad y las moléculas se transportarán más rápido de un lugar a otro.

1.2 LEY DE FICK

Estos mecanismos de transferencia de masa explicados en el tema anterior, con frecuencia actúan simultáneamente, sin embargo uno puede ser dominante, este proceso puede ser descrito con la Ley de Fick publicada en 1855.

Si se considera el siguiente sistema de la imagen 1, para el estudio de la difusión el cual consiste en dos recipientes de igual volumen conectados por un tubo capilar largo; en un principio el recipiente del lado izquierdo contiene oxígeno y el derecho nitrógeno, el sistema se considera a temperatura constante y presión constantes. Si deseamos conocer la rapidez con la que se mezclan ambos gases, al abrir la válvula después de un cierto tiempo el oxígeno se abra difundido en el recipiente de nitrógeno y viceversa. Si se realizan repetidas mediciones de la concentración del O₂, se observa que su concentración varía linealmente con el tiempo. [9]

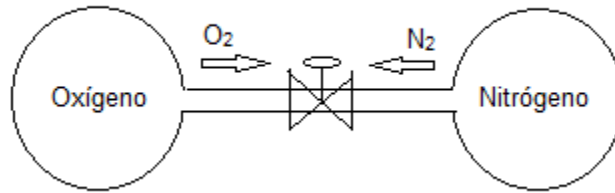


Imagen 1. Movimiento de masa por difusión a través de un tubo capilar que está conectado a dos recipientes de oxígeno y nitrógeno.

$$\left(\begin{array}{c} \text{Flujo difusivo} \\ \text{de O}_2 \end{array} \right) = \frac{\text{moles de O}_2 \text{ transferidos}}{\text{tiempo}} = \frac{C_{O_2} V_{bulbo}}{t} \quad (1.1)$$

Para hacer que el experimento sea independiente de las características del aparato utilizado, es conveniente que no dependa del área del capilar, para esto se debe dividir el flujo del O₂ por el área transversal del capilar, para obtener el flux en términos de variables medibles.

$$\left(\begin{array}{c} \text{Flux difusivo} \\ \text{de O}_2 \end{array} \right) = \frac{\text{moles de O}_2 \text{ transferidos}}{(\text{tiempo})(\text{área del capilar})} = \frac{C_{O_2} V_{bulbo}}{tA_s} \quad (1.1.1)$$

El flux difusivo depende de un gradiente de concentración, entre más grande sea la concentración mayor será el movimiento de masa, por lo que es razonable suponer que el flux difusivo de oxígeno es proporcional a la diferencia de concentración.

$$\text{flux difusivo de O}_2 = k (\text{diferencia de concentración O}_2) \quad (1.1.2)$$

Donde k es una constante de proporcionalidad.

Si observamos nuevamente la imagen 1, para que haya difusión el O₂ debe transportarse a través del capilar hacia el recipiente que contiene N₂, por lo tanto entre mayor sea la longitud del capilar, más tardara el O₂ en difundirse. Por lo que se supone que el flux difusivo es inversamente proporcional a la longitud del capilar en el cual ocurre la difusión.

$$\text{flux difusivo de O}_2 = D \frac{\text{diferencia de concentración de O}_2}{\text{longitud del capilar}} = D \frac{\Delta C_{O_2}}{L} \quad (1.1.3)$$

Con el ejemplo anterior se llegó a la Ec. 1.1.3, donde se introduce una constante D denominada como coeficiente de difusión que proviene de la llamada Ley de Fick.

Es fundamental establecer el modelo ya que el resultado obtenido en el desarrollo anterior es intuitivo. Por lo que se propone un nuevo sistema:

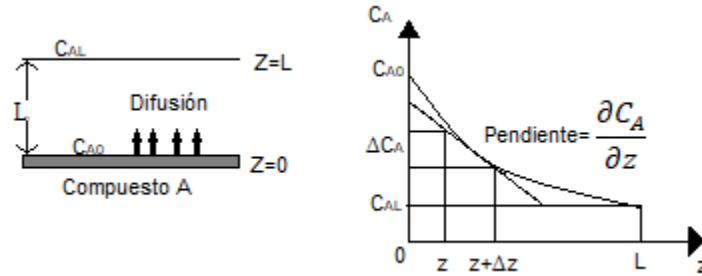


Imagen 2. Difusión del soluto A en B con una longitud total L

En la imagen 2 se representa una capa de líquido B sobre una superficie sólida de A que es ligeramente soluble en el líquido B. El líquido al estar en contacto con el soluto A tiene una concentración inicial C_{A0} , a medida que el tiempo t aumenta el soluto A comienza a difundirse en la película líquida; la cual se representa en la curva, en consecuencia de esta distribución de concentración del soluto A en el líquido B la concentración al final de la película líquida es; C_{AL} . Podemos conocer el flux difusivo del sistema propuesto en base a la Ec. 1.1.4:

$$J_A = D_{AB} \frac{C_{A0} - C_{AL}}{L} = D_{AB} \frac{\Delta C_A}{L} \quad (1.1.4)$$

Donde:

J_A representa el flux difusivo de la especie A.

D_{AB} es el coeficiente de difusión del componente de un componente A en una solución B.

$C_{A0} - C_{AL}$ es la diferencia de concentración desde $z=0$ a $z=L$.

L es el espesor de la película líquida.

Si se quiere el flux difusivo de la especie A a cualquier distancia y cualquier tiempo, la diferencia de concentración sobre una distancia Δz estará dada por:

$$\Delta C_A = C_A(z + \Delta z) - C_A(z) \quad (1.1.5)$$

En la imagen anterior $\Delta C_A / \Delta z$ representa la pendiente promedio sobre la región Δz . Si se sustituye la Ec. 1.1.5 en la Ec. 1.1.4 tomando como límite cuando $\Delta z \rightarrow 0$ obtenemos la derivada parcial de C_A con respecto a z , obtenemos:

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} -D_{AB} \frac{\Delta C_A}{\Delta z} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} -D_{AB} \frac{C_A(z + \Delta z) - C_A(z)}{\Delta z} = \frac{\partial C_A}{\partial z} \quad (1.1.6)$$

Por lo tanto, el flux difusivo para el componente A a cualquier distancia y tiempo está dado por la ecuación de Fick:

$$J_A = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial z} \quad (1.1.7)$$

El signo negativo de la Ec. 1.1.7 se debe a la difusión ocurre en el sentido de la disminución de la concentración, por lo que el gradiente es negativo pero el flujo de masa debe ser positivo.

Lobo [4] simplifica el significado físico de la ley de Fick en los cuatro puntos descritos a continuación:

- Existe una tendencia natural (espontánea) para que cualquier soluto se difunda desde la región de alta concentración a la región de baja concentración.
- Esta tendencia depende de la naturaleza de la mezcla, esto es, del coeficiente de difusión.
- La magnitud del flux difusivo es directamente proporcional a la magnitud del gradiente de concentración.
- El flux difusivo y el gradiente de concentración tienen direcciones opuestas.

1.3 ABSORCIÓN

La absorción es una operación de transferencia de masa que involucra el contacto entre dos fases; líquida y gaseosa, en el cual debe de existir una penetración física de una fase en la otra. Se utiliza para eliminar uno o varios componentes de una corriente gaseosa utilizando un disolvente.

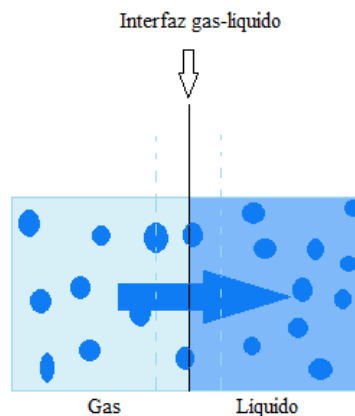


Imagen 3. Fenómeno de absorción Gas-Líquido.

Existen dos tipos de absorción:

- Absorción Física: Consiste en un proceso por el cual un gas solo se disuelve en un líquido que tiene capacidad absorbente. El gas se elimina por tener mayor solubilidad en el solvente que otros gases.
- Absorción Química: Es un proceso que consiste en la separación de uno o más componentes de un gas haciendo uso de un solvente líquido que permitirá crear una solución.

En la industria actual la absorción es un proceso de separación muy utilizado, que se realiza en columnas o torres de absorción; en la primera el contacto entre las fases se da en los platos de la columna y se dice que el contacto es discontinuo; en la segunda existe una región llamada interfase en toda la columna y por lo tanto el proceso es continuo.

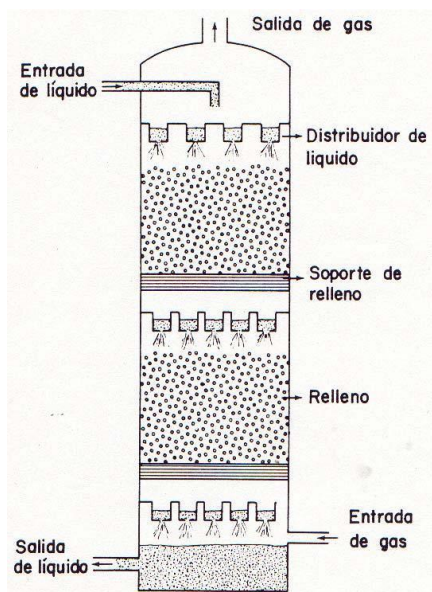


Imagen 4. Torre empacada de absorción

Las columnas empacadas son cilindros verticales rellenos de algún material químicamente inerte con las fases y los compuestos de interés, tiene dos entradas y dos salidas; para la fase líquida y la fase gas. En la Imagen 4 se muestra un esquema de lo que sucede en una torre de absorción empacada; por la parte superior de la columna se encuentra la entrada del líquido de una determinada composición, el cual escurrirá por toda la torre mojando todo el empaque formando así una área o interfase a la transferencia de masa donde se absorberá el compuesto de interés. También en esta parte se encuentra la salida del gas con menor concentración del componente de interés que la concentración inicial a la que entró por la parte inferior de la columna ascendiendo por un gradiente de

presión. En la parte inferior de la columna se encuentra la salida de la corriente de la fase líquida la cual desciende a lo largo de la columna, aquí la fase líquida es rica en el compuesto de interés.

1.4 CONTRADIFUSIÓN

Existen casos en los que la transferencia de masa de los componentes de un sistema se transporta en dirección opuesta; es decir, la transferencia de masa de un compuesto A va acompañado del transporte de la otra especie. Cuando esto ocurre se dice que existe una contradifusión.

Contradifusión equimolar

En la imagen 5 las moléculas del A (O₂) se difunden hacia la derecha y las moléculas de B (N₂) hacia la izquierda, ya que la presión del sistema es constante, se considera que cada mol de A que se difunde en una mezcla binaria es repuesto con un flujo de igual magnitud pero de signo contrario de B. En el recipiente del compuesto A la concentración inicial es y_{A0} y en el recipiente de lado derecho la concentración de A sería y_{AL} , donde $y_{A0} > y_{AL}$.

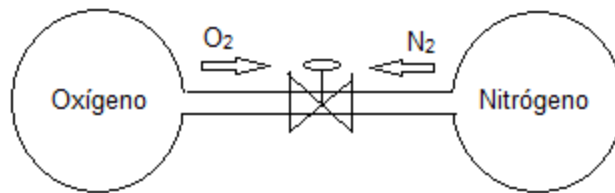


Imagen 5. Movimiento de masa por difusión a través de un tubo capilar que está conectado a dos recipientes de oxígeno y nitrógeno.

Debido a que la presión y temperatura de ambos gases se mantiene constante, por lo tanto de la Ley de los gases ideales la concentración molar $C = P/RT$ total se mantiene constante, y se puede concluir que la velocidad promedio de la mezcla será cero.

$$N_{A,z} = -N_{B,z} \quad (1.1.8)$$

El flux molar del componente A puede expresarse:

$$N_{A,z} = -CD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(N_{A,z} + N_{B,z}) = -CD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(0) \quad (1.1.9)$$

Debido a que $N_{A,z}$ es constante, la Ec. 1.1.9 puede integrarse fácilmente separando variables y usando las siguientes condiciones a la frontera:

$$y_A(z=0) = y_{A0}$$

$$y_A(z=L) = y_{AL}$$

$$N_{A,z} = \frac{CD_{AB}}{L}(y_{A0} - y_{AL}) = \frac{D_{AB}}{L}(C_{A0} - C_{AL}) \quad (1.1.10)$$

El flux molar total Ec. 1.1.10 para ambos compuestos, ya que la magnitud de los fluxes es la misma pero de signo contrario debido a que los efectos de convección se cancelan.

Contradifusión no equimolar

Existen otros casos diferentes a la contradifusión equimolar, en los cuales el flux molar total en una dirección es diferente del flux molar total en la dirección opuesta, y ninguno de los dos es 0. Un Ejemplo de estos casos se da en la reacción de desintegración catalítica como $A \rightarrow nB$ o en las reacciones de condensación $nA \rightarrow B$

Para llegar a la ecuación que describe la contradifusión no equimolar se parte de la ecuación general de transferencia de masa:

$$N_{Az} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(N_{Az} + N_{Bz}) \quad (1.2.1)$$

Donde

$$\frac{N_A}{N_B} = \frac{1}{-n} \quad \text{por lo tanto } N_B = -nN_A$$

Sustituyendo en la Ec.1.2.1 se tiene:

$$N_{Az} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(N_{Az} - nN_{Az})$$

En general podemos escribir la Ec. 1.2.1 como:

$$N_{Az} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(N_T)$$

Separando variables:

$$N_{Az} - y_A N_T = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz}$$

$$N_{Az} \left(1 - y_A \frac{N_T}{N_{Az}} \right) = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz}$$

Resolviendo la integral indicando los límites de integración:

$$N_A \int_{z=0}^{z=L} dz = -cD_{AB} \int_{y_{A0}}^{y_{AL}} \frac{dy_A}{(1-\alpha y_A)} \quad \text{donde } \alpha = \frac{N_A}{N_T}$$

$$N_{Az} = \frac{cD_{AB}}{L\alpha} \ln \left(\frac{1-\alpha y_{AL}}{1-\alpha y_{A0}} \right) \quad (1.2.2)$$

La Ec. 1.2.2 cuantifica la cantidad de materia transferida por unidad de área por unidad de tiempo (flux molar) para un fenómeno de contradifusión no equimolar. Esta ecuación es válida para todo tipo de transporte en una mezcla binaria, excepto para la contradifusión equimolar. [9]

1.5 TRANSFERENCIA DE MASA A TRAVÉS DE UN MEDIO ESTANCADO

Los fenómenos de difusión y convección con frecuencia actúan simultáneamente. Para analizar este fenómeno refirámonos al sistema ilustrado en la Imagen 6. Este caso se representa a través de un capilar en acetona a presión y temperatura constantes, se supone que los gases se comportan idealmente y se considera que la solución está concentrada.

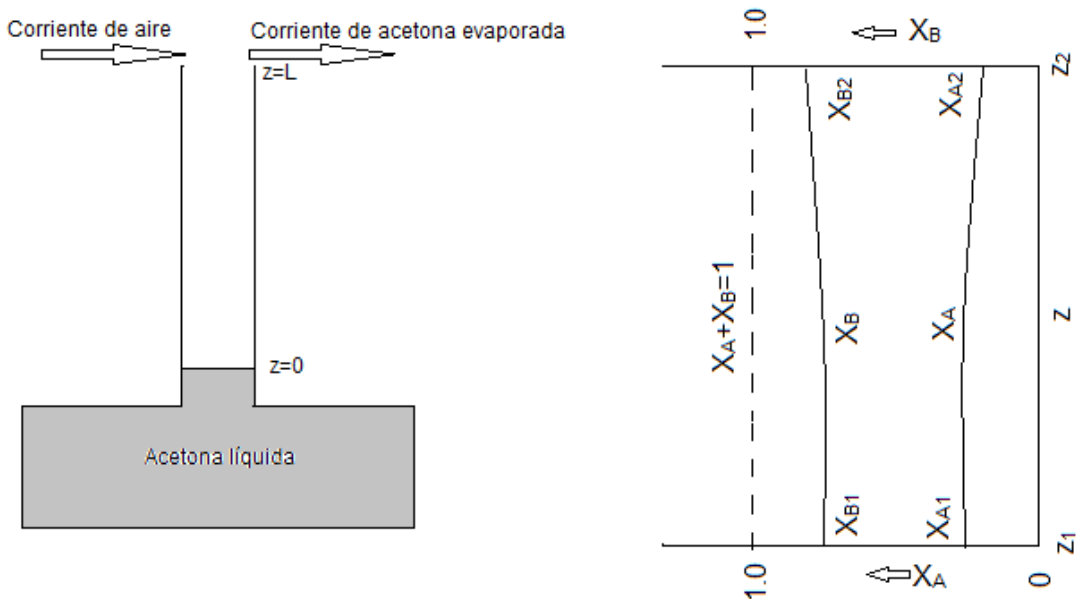


Imagen 6. . Difusión de A a través de una película estancada. La grafica muestra los perfiles de concentración los cuales son desviados de las líneas rectas debido a la contribución de la convección a la densidad de flujo de masa.

El líquido A se evapora en el seno de la fase gaseosa B (aire) el cual es insoluble en el líquido y se encuentra estancado. Suponiendo que la interfase gas-liquido permanece fija y en equilibrio, la concentración en la fase gaseosa de A en $z = 0$ se

toma como la concentración correspondiente al equilibrio con el líquido en la interfase, por lo que composición del gas B expresada en fracción mol es $x_{A0} = p_A^{vap} / P$ donde y_{A0} es la presión de vapor de B dividida entre la presión total. En la parte superior de la columna pasa una mezcla gaseosa de A y B de composición fija de manera que la concentración de B en $z=L$ se mantiene constante con un valor de x_{AL} .

Ecuación general de transferencia de masa:

$$N_{Az} = -cD_{AB} \frac{dx_A}{dz} + x_A(N_{Az} + N_{Bz}) \quad (1.2.3)$$

Donde

$N_{Bz} = 0$ el termino convectivo del aire vale 0 por que se encuentra estancado.

Por lo tanto:

$$N_{Az} = -cD_{AB} \frac{dx_A}{dz} + x_A(N_{Az}) \quad (1.2.4)$$

Separando variables y poniendo límites a la integral:

$$N_{Az}(1-x_A) = -cD_{AB} \frac{dx_A}{dz}$$

$$N_{Az} = -\frac{cD_{AB}}{(1-x_A)} \frac{dx_A}{dz}$$

$$N_{Az} \int_{z=0}^{z=L} dz = -cD_{AB} \int_{x_{A0}}^{x_{AL}} \frac{dx_A}{(1-x_A)}$$

Resolviendo la integral se llega a la ecuación de transferencia de masa en la interfase gas-liquido:

$$N_{Az} = \frac{cD_{AB}}{z_2 - z_1} \ln \left(\frac{1-x_{AL}}{1-x_{A0}} \right) \quad (1.2.5)$$

O bien:

$$N_{Az} = \frac{cD_{AB}}{(z_2 - z_1)(x_B)_{ln}} \ln(x_{A1} - x_{A2})$$

Las Ec.1.2.5 representan el flux molar del componente A en un fenómeno de difusión a través de un medio estancado, ambas ecuaciones son equivalentes. Para

ver más a detalle la solución para llegar a estas ecuaciones se muestra en el apéndice A.

1.6 CONCEPTO DE COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA

En la mayor parte de las operaciones de transferencia de masa que debido a su complejidad, solo es posible conocer la concentración promedio pero no es posible conocer la distancia exacta sobre la cual ocurre el proceso de transferencia de masa, ya que estas operaciones es deseable llevarla a cabo en flujo turbulento, con el propósito favorecer la difusión de un fluido a otro haciendo que este aumente la velocidad de transferencia de masa por unidad de volumen. Sin embargo estos problemas se pueden tratar de manera más sencilla con los coeficientes de transferencia de masa.

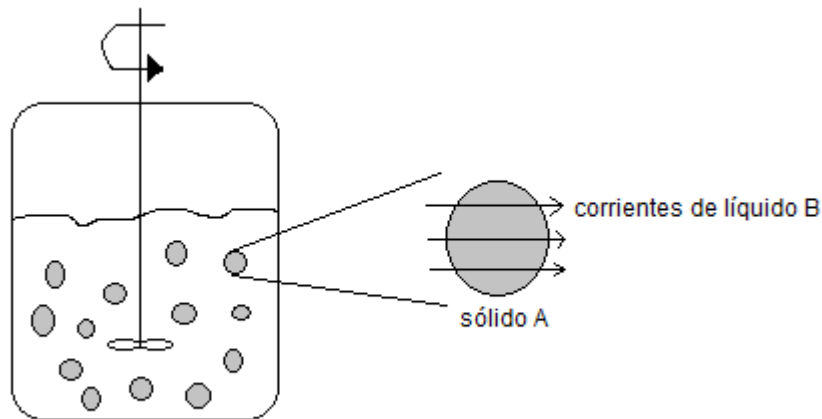


Imagen 7. Concepto de coeficientes de transferencia de masa; donde se pone en contacto un sólido A con un líquido y esta es agitado.

En la Imagen 7 se ilustra un ejemplo del modelo de coeficientes de transferencia de masa, se tiene un recipiente se pone en contacto un sólido A con el líquido B , si se agita la mezcla en el recipiente se forman pequeños remolinos que arrastran las partículas del componente A para mezclarlo con el resto del líquido que hay en el recipiente; lo que ocasiona que además de la transferencia de masa por difusión tenemos un fenómeno de convección forzada.

Considerando que el líquido está bien agitado y que la concentración del soluto será uniforme en él, solo conocemos la concentración inicial del soluto A al estar en contacto con el líquido es C_{A1} , la concentración promedio del soluto A en el líquido se puede medir experimentalmente conforme con forme este se va disolviendo.

Para calcular la cantidad total del sólido disuelto en el líquido por unidad de tiempo, Lobo [9] cita dos supuestos que fueron planteados también para la ley de Fick:

1). El flux molar es proporcional a la diferencia de concentración del soluto A que existe entre el líquido que toca la superficie del sólido y la concentración promedio en el seno del líquido ($C_{A1} - C_{A2}$)

2). El flux molar es proporcional al área de las partículas sólidas, A_s . Por lo tanto:

$$W_A = k_c \Delta C_A A_s = k_c (C_{A1} - C_{A2}) A_s \quad (1.2.6)$$

Donde k_c es el coeficiente de transferencia de masa. Si se divide la Ec. 1.2.6 por el área de las partículas, se obtiene el flux total del soluto A:

$$\frac{W_A}{A_s} = N_A = k_c \Delta C_A = k_c (C_{A1} - C_{A2}) \quad (1.2.7)$$

Donde N_A es el flux total de moles del soluto A que fueron disueltos.

La teoría del modelo de la ley de Fick y el coeficiente de transferencia de masa tienen el mismo propósito: cuantificar el transporte de masa. Estos dos modelos son de gran importancia en el análisis de la mayoría de los problemas de transporte de masa, ya que ambos modelos comparten la misma hipótesis; que el flux es proporcional a la diferencia de concentración, la elección de uno de estos modelos dependerá de que se quiera conocer y que se puede medir.

CAPÍTULO 2. GENERALIDADES

2.0 FUNDAMENTOS DE LA TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL

Los procesos de transferencia de masa tienen un papel muy importante, ya que la mayoría de los procesos químicos requieren de la purificación inicial de las materias primas o de la separación final de productos y subproductos, para esto se utilizan operaciones industriales en las cuales la transferencia se presenta desde el seno del fluido de una fase al seno del fluido de otra fase, pasando por la interfase. Ejemplos de ello son la absorción, la extracción líquido-líquido y los reactores químicos.

La transferencia de masa se da cuando se ponen en contacto dos fases que tiene diferente composición. El producto de interés A se difunde y migra desde zonas de concentraciones altas a concentraciones más bajas, dando como resultado un gradiente de concentración, como se muestra en la Imagen 8.

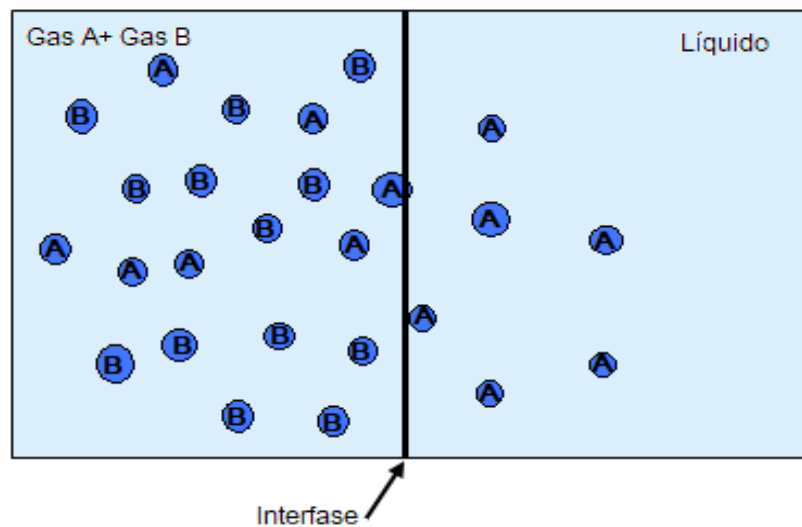


Imagen 8. Transferencia de masa interfacial gas-líquido

2.1 POSTULADOS DE LA TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL

2.1.1 TEORÍA DE LA DOBLE PELÍCULA

La Teoría de la doble película propuesta por Nernst en 1904, sostiene que existen dos películas estancadas en ambos lados de la interfase, ambas películas formadas por los propios fluidos son una resistencia a la transferencia de masa.

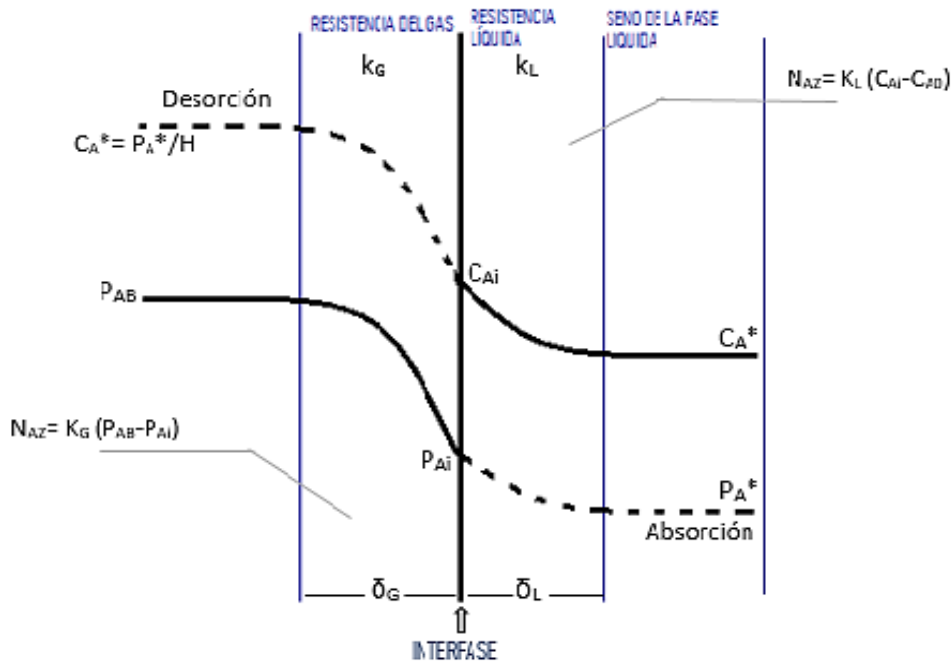


Imagen 9. Modelo de la doble película para el caso de una absorción gas-líquido.

El proceso de transferencia de masa ocurre desde la fase gas hasta el seno de la fase líquida. En una mezcla de gas A y B con una presión parcial P_{AB} , donde el compuesto B al no ser soluble en la fase líquida queda estancando en la fase gas, por lo que ocasiona una resistencia a la transferencia de masa con un espesor δ_G , el compuesto de interés A se transfiere desde el seno del gas hacia una región de contacto entre las dos resistencias llamada interfase; aquí es donde entra una competencia entre dos fenómenos, el fenómeno de disolución y el fenómeno de difusión. Si se asume que el componente A se disuelve en el líquido a mayor velocidad a como se difunde, se forma una zona de alta concentración del componente A disuelto que genera una resistencia a la transferencia de masa con un espesor δ_L . Debido a que la región interfacial no tiene espesor se considera que todo el proceso de transferencia de masa se da en estado estacionario, por lo tanto

no existe acumulación en la interfase, en ella coexisten dos concentraciones en diferentes fases P_{Ai} y C_{Ai} , donde se supone un equilibrio que se presenta cuando la rapidez de transferencia de masa que pasa a la fase líquida es igual a la rapidez de transferencia de masa que pasa a la fase gas.

Al haber un equilibrio interno en la interfase, también se habla de un equilibrio externo que surge desde la fase gas hasta el seno de la fase líquida, en la imagen 9, si se sigue la trayectoria hipotética dada por la línea punteada del componente A desde la interfase hasta el seno de la fase líquida se puede obtener la concentración P_A^* la cual no es posible medir directamente por lo que es necesario estimarla a partir de la Ley de Henry Ec. 2.1

$$P_A^* = HC_A^* \quad (2.1)$$

Cuando el componente A se encuentra saturado en la fase líquida este tiende a migrar nuevamente hacia la fase gas llevándose a cabo un fenómeno de desorción. Cuando el número de moles del componente A que pasan desde el seno de la fase gas al seno de la fase líquida debe ser igual al número de moles de A que pasan desde el seno de la fase líquida a la fase gas, se puede decir que el sistema se encuentra en equilibrio.

La cantidad de masa que llega a la interfase del lado del gas puede describirse:

$$N_{AG} = k_G(P_{AB} - P_{Ai}) \quad (2.1.1)$$

Donde $k_G = \text{mol} / \text{cm}^2 \text{s atm}$ es el coeficiente individual de transferencia de masa del lado del gas.

La cantidad de masa que se transfiere desde la interfase hacia el seno de la fase líquida, está dado por:

$$N_{AL} = k_L(C_{Ai} - C_{AB}) \quad (2.1.2)$$

Donde $k_L = \text{cm} / \text{s}$ es el coeficiente individual de transferencia de masa del lado del líquido.

Dado que la transferencia de masa entre las fases se da en estado estacionario, se puede escribir un flux total de transferencia de masa en términos de dos resistencias individuales k_G y k_L , que va desde la fase gas hasta el seno de la fase líquida. En el Apéndice B se muestra con más detalle las deducciones para obtener la siguiente ecuación.

$$N_{Az} = \frac{1}{\frac{1}{k_G} + \frac{H}{k_L}} (P_{AB} - HC_{AB}) \quad (2.1.3)$$

Esta ecuación nos indica que ahora se tiene un flux que se puede evaluar en base a concentraciones medibles en términos tanto de la fase gas como de la fase líquida.

El mecanismo de la doble película tiende a describir el fenómeno que sucede en la interfase así como lo que sucede desde el seno de la fase gas hasta el seno de la fase líquida, sin embargo existen otras teorías que explican de una manera diferente la dinámica que se presenta en el fenómeno. Así con el estudio de estas teorías se pretende entender los procesos de transferencia de masa.

2.1.2 TEORÍA DE LA PENETRACIÓN

La teoría de la penetración propuesta por Higbie en 1935 que describe de una manera más exacta el mecanismo de transferencia de masa en la superficie. Higbie observó que en muchas operaciones industriales como la absorción de un gas en un líquido, el contacto entre las fases era de muy corta duración y se repetía frecuentemente a lo largo del equipo. Este corto tiempo de exposición no permite el desarrollo del gradiente de concentración como en la teoría de la película, y por lo tanto no alcanza un estado estacionario para el proceso de transferencia de masa local. Supone que la absorción se da cuando se ponen en contacto dos fluidos, el soluto se difunde a una corta distancia en el absorbente, esto ocurre antes de alcanzar la homogeneidad de la disolución.

Higbie desarrolló su teoría para tomar en cuenta que en muchos casos la transferencia de masa ocurre por difusión molecular en régimen transitorio. Un ejemplo para describir la teoría es la imagen 10, donde se muestra la absorción de un gas A que es soluble en el líquido B. Inicialmente una burbuja de gas A se encuentra en contacto con el líquido en ese momento una partícula de este líquido se ubica en la parte superior de dicha burbuja, esta partícula está en contacto durante un tiempo t_c , mismo que requiere la burbuja para difundirse a una distancia igual a su diámetro, mientras que la partícula líquida resbala a lo largo de la superficie de la burbuja y es reemplazado por líquido fresco.

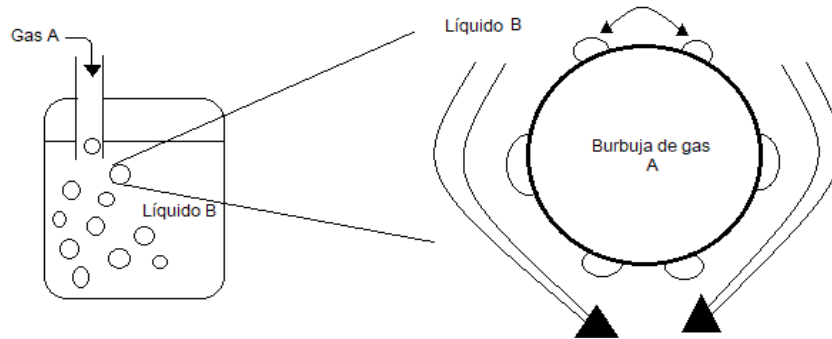


Imagen 10. Modelo de la teoría de la penetración

Para el modelo de la penetración el proceso de difusión se describe por la ecuación:

$$D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (2.1.4)$$

Cuyas condiciones iniciales y de fronteras son:

$$C_A = C_{A0}; \text{ a } t=0 \text{ para } 0 \leq z \leq \infty \quad (2.1.4-a)$$

$$C_A = C_{Ai}; \text{ a } z=0 \text{ para } t > 0 \quad (2.1.4-b)$$

$$C_A = C_{A0}; \text{ a } z=\infty \text{ para } t > 0 \quad (2.1.4-c)$$

La solución a la Ec. 2.1.4 es:

$$\frac{C_{Ai} - C_A}{C_{Ai} - C_{A0}} = \text{ferc} \left(\frac{z}{\sqrt{4D_{AB}t}} \right) \quad (2.1.5)$$

Donde ferc se define como la función error complementaria.

El flux instantáneo del soluto A que penetra al líquido puede calcularse derivando el perfil de concentraciones y sustituyendo el resultado en la primera ley de Fick:

$$N_{Az} = -D_{AB} \left. \frac{dC_A}{dz} \right|_{z=0}$$

$$N_A(t) \Big|_{z=0} = -D_{AB} \left(\frac{\partial C_A}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = (C_{Ai} - C_A^*) \left(\frac{D_{AB}}{\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.1.6)$$

$$\bar{N}_A = \frac{(C_{Ai} - C_A) \sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi}} \int_0^{t_c} \frac{dt}{t^{\frac{1}{2}}}}{\int_0^{t_c} dt} = \sqrt{\frac{4D_{AB}}{\pi t}} (C_{Ai} - C_A^*) \quad (2.1.7)$$

Si escribimos el flux promedio en términos del coeficiente de transferencia de masa obtenemos así el coeficiente de transferencia de masa promedio:

$$\bar{k}_c = \frac{\bar{N}_A}{(C_{Ai} - C_A^*)} = 2 \sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi t_c}} \quad (2.1.8)$$

2.1.3 TEORÍA DE LA RENOVACIÓN DE LA SUPERFICIE

El modelo de la renovación de la superficie propuesto por Danckwerts en 1951 establece una extensión de la teoría de la penetración, si bien en la teoría de penetración de Higbie supone que el tiempo en el que ocurre la transferencia interfacial t_c , en un elemento de líquido es constante, en el modelo de la renovación de la superficie propone que el tiempo de exposición constante se reemplace por un tiempo promedio que se determina a partir de un tiempo supuesto y que la probabilidad de que un elemento de la superficie sea reemplazado por otro proveniente del seno del fluido era independiente del tiempo que dicho elemento tuviera ya en la interfase.

Danckwerts consideró que la rapidez de renovación de la superficie interfacial depende de la cantidad de tiempo que cada elemento de fluido permanece en la interfase, esto permite que los elementos del fluido permanezcan en la interfase por extensiones de tiempos variables que pueden ser desde cero hasta infinito. Durante la permanencia de estos elementos en la región interfacial la transferencia de masa se da por difusión en régimen transitorio. En vista de que los elementos de fluido entran y salen de la zona interfacial, podemos decir que la superficie de la interfase se está renovando constantemente. [9]

La función de distribución de edades de los elementos de fluido en la superficie interfacial propuesta por Danckwerts es:

$$\phi(t) = S e^{-st} = \frac{e^{-\frac{t}{\tau_r}}}{\tau_r} \quad (2.1.9)$$

Donde

$\phi(t)$ = es la probabilidad de que cualquier elemento de la superficie interfacial esté expuesto a la penetración de soluto durante un tiempo t , antes de ser reemplazado por fluido fresco proveniente del seno del fluido.

S es la rapidez fraccional de renovación de la superficie = $\frac{t}{\tau_r}$

τ_r es el tiempo de residencia promedio de un elemento de superficie interfacial.

La expresión del flux instantáneo es la misma que la dada por la teoría de Higbie en la Ec.2.2 pero el flux promedio estará dado por:

$$\overline{N_A} = \int_0^{\infty} \phi(t) N_A(t) \Big|_{z=0} dt$$

Donde

$$N_A(t) \Big|_{z=0} = -D_{AB} \left(\frac{\partial C_A}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = (C_{Ai} - C_A^*) \left(\frac{D_{AB}}{\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.2)$$

$$\int_0^{\infty} S e^{-st} (C_{Ai} - C_A^*) \left(\frac{D_{AB}}{\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} dt = \sqrt{D_{AB} S} (C_{Ai} - C_A^*)$$

$$\overline{N_A} = (C_{Ai} - C_A^*) \left(\frac{D_{AB}}{\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\pi S} = \sqrt{D_{AB} S} (C_{Ai} - C_A^*) \quad (2.3)$$

En el apéndice C se muestra con más detalle la solución a la integral para obtener la Ec.2.3.

Donde

$$\overline{k_c} = \sqrt{D_{AB} S}$$

El modelo de Danckwerts predice que el flux y el coeficiente de transferencia de masa son proporcionales a $\sqrt{D_{AB}}$ como lo hace el modelo de Higbie. El parámetro S es desconocido y debe determinarse previo conocimiento experimental del coeficiente de transferencia de masa.

Aunque la imagen física del modelo de Danckwerts es más realista que la de Higbie y la del modelo de la película, existen modelos más complejos que los anteriormente descritos que dan imágenes físicas más cercanas a la realidad, sin embargo, su utilidad es limitada.

2.2.1 TEORÍA DE LA DOBLE PELÍCULA CON REACCIÓN QUÍMICA

En muchos procesos industriales de absorción, la transferencia de masa es gobernada por la solubilidad como se explicó en la teoría de la doble película, sin embargo se puede presentar el caso que el compuesto de interés A no solo se diluye y se difunde en el líquido, sino que además reacciona con otro compuesto B dentro de la fase líquida.

El reactivo A debe migrar hacia la fase líquida B para que ocurra la reacción, en la imagen 11, se observa que el reactivo A (gas) al tener contacto por primera vez con el reactivo B (líquido) este primero se disuelve para posteriormente difundirse y finalmente llevarse a cabo la reacción en la resistencia líquida. Al iniciar la reacción se crea un perfil de concentraciones donde la concentración C_A decrece hasta el seno del líquido mientras que la concentración C_B decrece en dirección a la fase gaseosa, promoviendo una contradifusión no equimolar.

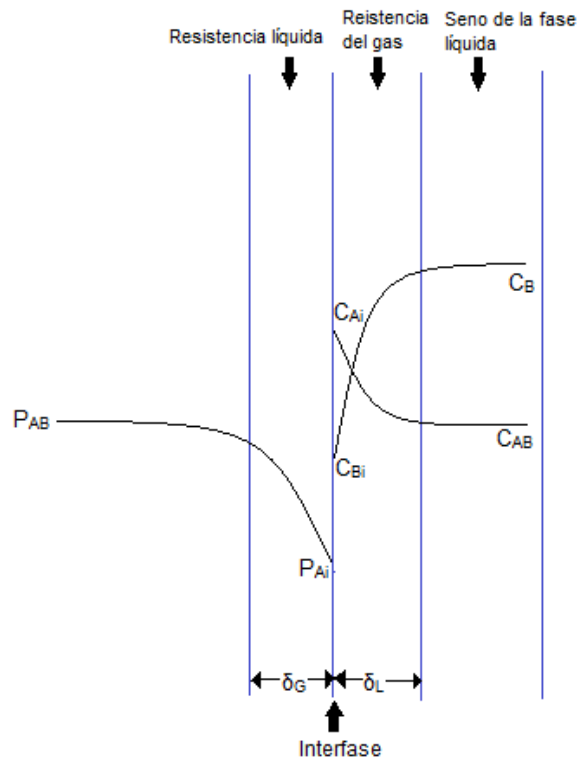


Imagen 11. Modelo de la doble película en presencia de una reacción química.

La reacción puede ocurrir en tres zonas:

1. En la interfase; cuando son reacciones instantáneas o la concentración de B es muy alta.
2. En la resistencia líquida; cuando la concentración del componente A es alta.
3. En el seno de la fase líquida; este caso se da cuando la reacción es lenta o infinitamente lenta.

Levenspiel [10] ha propuesto ocho casos de cómo se puede llevar a cabo la reacción.

El Balance de materia a través de la interfase en términos de los coeficientes de transferencia de masa cuando existe una reacción está dado por:

$$R_A a = k_G a (P_{AB} - H C_{Ai}) = E k_L a (C_{Ai} - C_A^*) \quad (2.4)$$

Donde:

R_A = Rapidez de transferencia de masa en presencia de una reacción química.

E = Factor de Mejora.

a = área específica de transferencia de masa [=] $\frac{m^2}{m^3}$

$k_G a$ = Coeficiente volumétrico [=] $\frac{kgmol}{cm^3 s atm}$

Dado a que el fenómeno no solo se lleva a cabo en la resistencia del gas y en la resistencia líquida, ya que también puede llevarse a cabo en el seno de la película líquida, debido a que existen reacciones extremadamente lentas, por lo que el flux del componente A puede expresarse considerando las tres resistencias. En el Apéndice D se muestra con más detalle las deducciones para obtener la siguiente ecuación.

$$R_A a = \frac{1}{\underbrace{\frac{1}{K_g a}}_{\text{Re sistencia de la fase gas}} + \underbrace{\frac{H}{E k_L a}}_{\text{Re sistencia de la fase líquida}} + \underbrace{\frac{H}{k C_B f_l}}_{\text{Re sistencia del líquido}}} (P_{Ab} - H C_{Ab}) \quad (2.5)$$

Donde

$$f_l = \frac{V_l}{V_r} = \frac{\text{Volumen del líquido}}{\text{Volumen del medio poroso}} \quad E = \text{Factor de Mejora}$$

2.2.3 CONCEPTO DE FACTOR DE MEJORA E

Durante un proceso de absorción cuando hay presencia de una reacción química, la difusión y la reacción se manifiestan simultáneamente de tal manera que incrementan la velocidad de transferencia de masa global. A esta relación entre la velocidad de absorción del componente A en presencia de una reacción química y la velocidad de absorción cuando no hay reacción se denomina factor de mejora E.

$$E = \frac{\text{Velocidad de absorción de A cuando se produce reacción}}{\text{Velocidad de absorción de A cuando no hay reacción}}$$

Puesto a que el fenómeno se lleva a cabo en la fase líquida, solo se considera la resistencia de la fase líquida y el seno de la fase líquida. En la imagen 12 se consideran dos regiones líquidas a diferentes concentraciones $C_A(0)$ y $C_A(L)$. Por conveniencia $C_A(L)=0$ por lo que se suponen dos zonas, una en resistencia líquida en $z=0$ a $z=L$ y la otra en el seno de la fase líquida desde $z=L$ a $z=$ indefinido, las cuales están en régimen permanente con la concentración dentro de la película líquida, es decir se ha establecido un perfil de concentraciones.

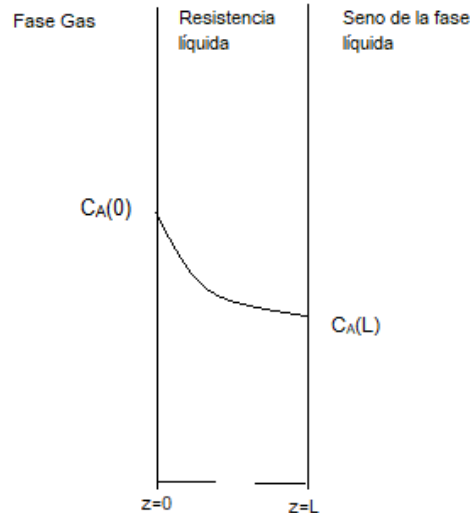


Imagen 12. Difusión a través de una película donde hay una reacción homogénea.

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + V_x \frac{\partial C_A}{\partial x} + V_y \frac{\partial C_A}{\partial y} + V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right) + R_A \quad (2.6)$$

Consideraciones del sistema:

- Régimen permanente
- difusión unidireccional en la dirección z
- Hay presencia de una reacción química

Por lo que la Ec. 2.6 se reduce a:

$$D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + R_A = 0 \quad (2.6.1)$$

$$R_A = -k_0 C_A^n, \text{ donde } n = 1 \quad (2.6.2)$$

Sustituyendo la Ec. 2.6.2 en la Ec.2.6.1

$$D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - k_0 C_A = 0 \quad (2.6.3)$$

Que debe ser resuelta bajo las siguientes condiciones a la frontera

$$z = 0 ; C_A = HP_A = C_{A_0}$$

$$z = L ; C_A = C_A(L) = 0$$

Las deducciones a detalle para obtener estas ecuaciones se reportan en el Apéndice E.

Cuando hay presencia de una reacción química el flux del componente A evaluado en z=0 está dado por la siguiente ecuación:

$$N_{A_{z=0}}^{C.R} = \frac{C_{A0} D_{AB}}{L} \left(\frac{b}{\tanh b} \right) \quad (2.6.4)$$

Si se observa el primer término $\frac{C_{A0} D_{AB}}{L}$ corresponde al flux de transferencia de masa sin reacción química multiplicado por un segundo término $\left(\frac{b}{\tanh b} \right)$ el cual indica que tanto se favorece el primer término.

Por lo tanto, el factor de mejora se puede escribir de la siguiente forma:

$$E = \frac{N_{A_{Z=0}}^{C.R}}{N_{A_{Z=0}}^{S.R}} = \left(\frac{b}{\tanh b} \right) \quad (2.7)$$

El factor de mejora es la cantidad finita mayor a 1 que indica que tanto favorece la reacción con respecto a la absorción sin reacción química, es decir, cuanto se ha mejorado la transferencia de masa por efecto de la reacción.

Donde

$$b = \left(\frac{kL^2}{D_{AB}} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ Módulo de Hatta}$$

El módulo de Hatta establece la relación entre la reacción química y el fenómeno de difusión, es decir es un número que nos dice que tanto se favorece el fenómeno de reacción o bien el fenómeno de difusión.

- Si el módulo de Hatta es igual a 1 significa que hay transferencia de masa sin presencia de una reacción química, es decir el fenómeno es puramente difusivo.
- Si el módulo Hatta es mayor a 1 significa que la velocidad de reacción es muy alta, es decir, el fenómeno que predomina es la reacción.

2.2.3 TIPOS DE REACCIÓN INTERFACIAL EXISTENTES

A continuación se describirán 8 casos posibles que Levenspiel [10] propuso en los cuales ilustra las posibles zonas donde se puede llevar a cabo la reacción.

CASO A: REACCIÓN INSTANTÁNEA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA CON C_A ALTO

El gas A se pone en contacto con la fase líquida B, el gas migra hasta llegar a la interfase en la cual se disuelve en el líquido B para finalmente iniciar la difusión hasta la zona de la resistencia líquida con una distancia δ_A . La reacción ocurre en la zona entre el líquido que contiene A y el líquido que contiene B. Debido a que la reacción es instantánea tanto el componente A como el B se consume en su totalidad provocando una contradifusión no equimolar entre ambas especies, descendiendo la concentración de C_A hasta cero tal como se muestra en la Imagen 13.

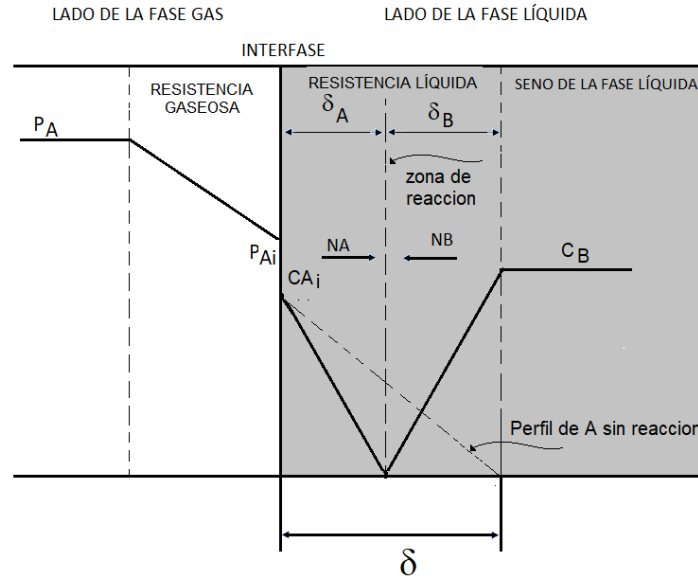


Imagen 13. Caso A. Reacción instantánea con CA alto, con resistencias gas-líquido presentes

Debido a que los reactivos se difunden en la zona de la resistencia líquida y esta depende de las concentraciones P_A y C_A , las velocidades de difusión de A y B determinarán la velocidad de transferencia de masa.

$$NA_z = R_A = -\frac{R_B}{b} = k_{Ag} (P_A - P_{Ai}) = k_{Al} (C_{Ai} - C_A) \delta_A = \frac{k_{Bl}}{b} (C_B - 0) \delta_B \quad (3)$$

Si se emplea la ley de Henry con el objetivo de eliminar la P_{Ai} y la composición C_{Ai} se puede establecer el flux del componente A en presencia de una reacción química de segundo orden con la restricción de tener una alta concentración de A.

$$RA_z = K_{Al} \left(1 + \frac{D_{Bl} C_B}{b D_{Al} C_{Ai}} \right) = K_{Al} \left(1 + \frac{D_{Bl} C_B H}{b D_{Al} P_A} \right)$$

$$K_{Ag} P_A > \frac{K_{Bl} C_B}{b}$$

El flux del componente A se ha demostrado en el Apéndice F de este trabajo y está dado por:

$$RA_Z = \frac{\left(\frac{P_A}{H}\right) + \frac{D_{Bl}}{D_{Al}} \frac{C_B}{b}}{\frac{1}{K_{Al}} + \frac{1}{K_{Ag} H}} \quad (3.1.2)$$

Mientras que el factor de mejora se podrá evaluar como:

$$E_i = 1 + \frac{H}{P_A} \left(\frac{D_{Bl}}{D_{Al}} \frac{C_B}{b} \right) \quad (3.1.3)$$

Donde E_i representa al factor de mejora para una reacción instantánea.

CASO B: REACCIÓN INSTANTÁNEA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA CON C_B ALTO

El gas A migra hasta llegar a la interfase en la cual reacciona de inmediato con el líquido ya que la concentración de B es mayor, por lo que C_{Ai} desciende hasta cero justo en la interfase. En este caso se puede decir que el fenómeno que predomina es la reacción, ya que al llegar a la interfase el componente A inmediatamente se disuelve y reacciona por lo que el fenómeno de difusión en la fase líquida desaparece, esto se puede observar en la Imagen 14.

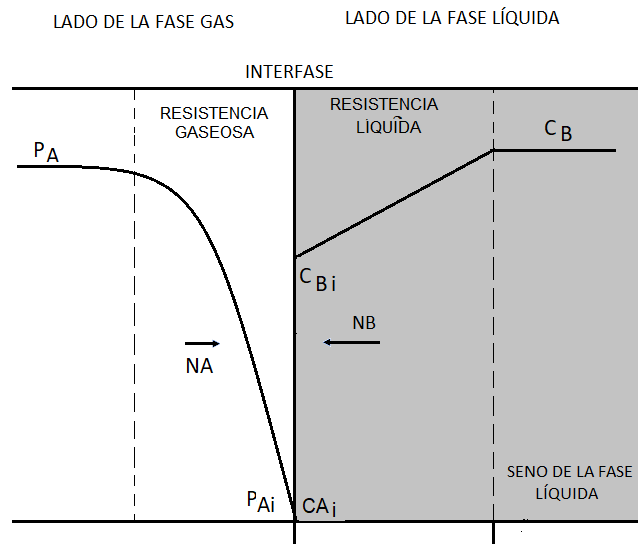


Imagen 14. Caso B. Reacción instantánea con C_B alto, con resistencias gas-líquido presentes

$$K_{Ag} P_A < \frac{K_{Bl}}{b} C_B \quad (3.1.4)$$

La condición de tener una concentración más alta del componente B que la del componente A que se ha disuelto, permite llevar a cabo la reacción inmediatamente, por lo que la interfase es la zona de reacción requerida y se expresa en la Ec. 3.1.4 teniendo como factor controlante a la resistencia de la fase gaseosa, y que el coeficiente de transferencia de masa del lado del líquido es muy grande ya que la difusividad D_{BL} prácticamente no existe, por lo que la Ec. 2.5 se reduce a:

$$RA_Z = K_{Ag} P_A \quad (3.1.5)$$

CASO C: REACCIÓN RÁPIDA CON C_B BAJO.

Cuando se ponen en contacto el componente A con la fase líquida B, el gas migra hasta llegar a la interfase para posteriormente disolverse con el líquido y finalmente iniciar la difusión hasta encontrar las condiciones adecuadas para reaccionar, la reacción se lleva a cabo dentro de la resistencia líquida como se ve en la imagen 15.

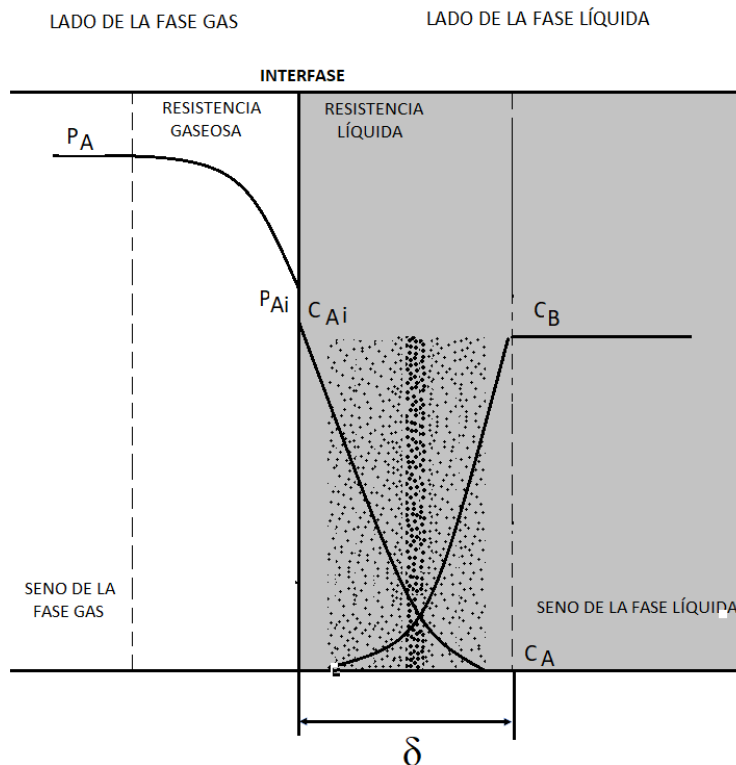


Imagen 15. Caso C. Reacción rápida con C_B bajo

La reacción no es lo suficientemente rápida como para llevarse a cabo en la interfase ni lo suficientemente lenta para llevarse en el seno de la fase líquida, por lo que el Flux únicamente considera las resistencias del lado del gas y del lado del líquido, en consecuencia el flux que considera las tres resistencias Ec. 2.5 se reduce a la Ec. 3.1.6.

$$R_A a = \frac{1}{\frac{1}{k_{Ag} a} + \frac{H}{k_{Al} a E}} P_A \quad (3.1.6)$$

Re sistance gaseosa
Re sistance líquida

CASO D: REACCIÓN RÁPIDA CON C_B ALTO, POR TANTO UNA REACCIÓN DE PSEUDO PRIMER ORDEN

Dada la alta concentración del componente B, su perfil no se ve afectado y puede como constante a lo largo de la película líquida, por lo contrario la composición del componente A disminuye hasta un valor igual a cero como se muestra en la imagen 16.

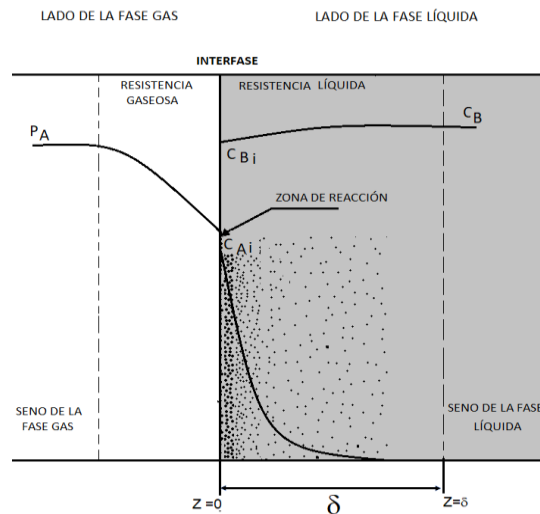


Imagen 16. Caso D. Reacción rápida con C_B alto, por tanto, cinética de pseudo primer orden con respecto a A.

Para esta condición cuando el módulo de Hatta es igual al factor de mejora dado por: $E = \sqrt{M} = \frac{\sqrt{k C_B D_{AL}}}{k_L}$ o $\sqrt{M} \gg 1$, Jamal [8] ha identificado a este régimen como régimen rápido o régimen de Pseudo primer orden. Debido a esto la velocidad de

reacción de segundo orden estudiado en el caso C se reduce a una reacción de pseudo primer orden Ec. 3.2 demostrado en el Apéndice F.

$$R_A a = \frac{1}{\frac{1}{k_{Ag} a} + \frac{H}{a \sqrt{D_{Al} k C_B}}} P_A \quad (3.2)$$

Re.sistencia gaseosa
Re.sistencia líquida

Este caso es el que más se adapta al fenómeno que se está estudiando en este trabajo, por lo que en el siguiente capítulo se explicará con más detalle.

CASO E Y F: VELOCIDAD INTERMEDIA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA

En este caso la reacción es suficientemente lenta para que A se difunda a través de la película líquida hasta llegar al seno de la fase líquida, lo que quiere decir que A reacciona tanto en la película líquida como en el seno de la película líquida, debido a esto la Ec. 3.2.1 para este caso presenta las tres resistencias:

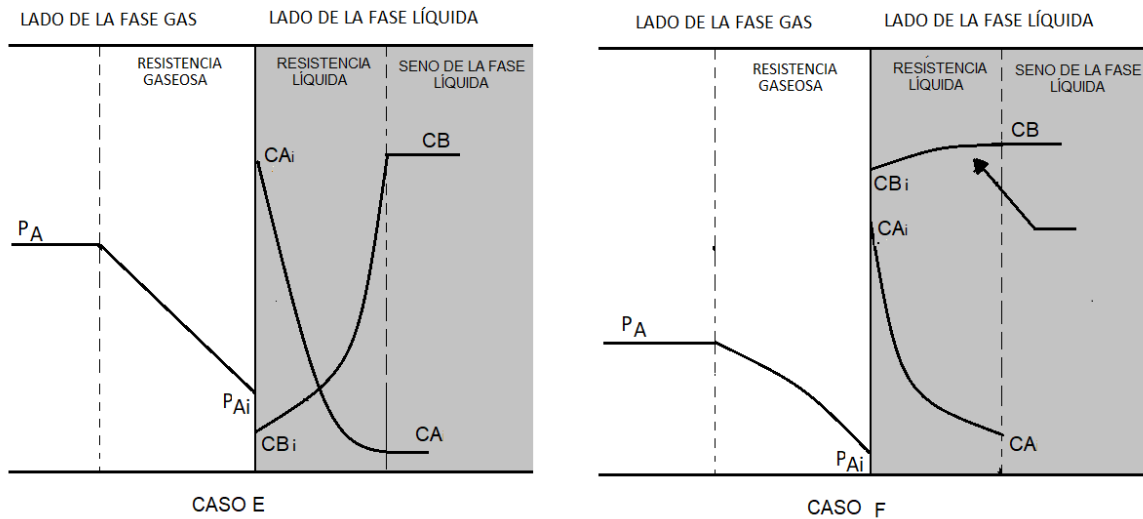


Imagen 17. Caso E y F. Velocidad intermedia con respecto a la transferencia de masa.

$$N_A a = R_A a = \frac{1}{\frac{1}{k_{Ag} a} + \frac{H}{k_{Al} a E} + \frac{H}{k f_l}} P_A \quad (3.2.1)$$

Re sistance gaseosa
Re sistance líquida
Re sistance de la reacción

CASO G: REACCIÓN LENTA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA

En este caso la reacción es lenta por lo que el componente A reacciona dentro del seno de la fase líquida, sin embargo existe una resistencia en la fase líquida que impide la difusión a la transferencia de A, por lo que en expresión de la rapidez de

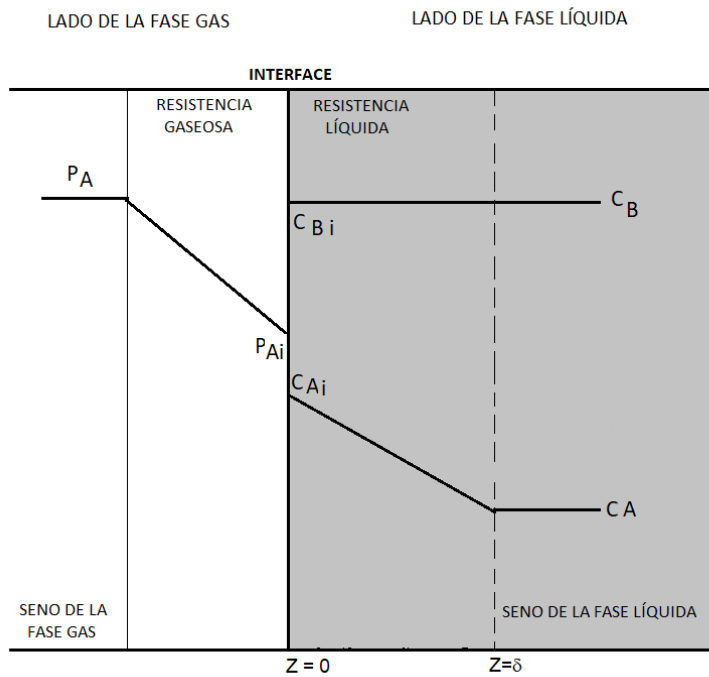


Imagen 18. Caso G. Reacción lenta con respecto a la transferencia de masa

$$N_A a = R_A a = \frac{1}{\frac{1}{k_{Ag} a} + \frac{H}{k_{Al} a E} + \frac{H}{k f_l}} P_A \quad (3.2.2)$$

Re sistance gaseosa
Re sistance líquida
Re sistance de la reacción

CASO H: REACCIÓN INFINITAMENTE LENTA CON RESPECTO A LA TRANSFERENCIA DE MASA

En este caso al ser la reacción infinitamente lenta las composiciones de A y B son uniformes en el líquido, esto se debe a que la resistencia a la transferencia de masa es insignificante. Sin embargo la reacción se lleva a cabo dentro del seno de la fase líquida y la velocidad de transferencia de masa está determinada por la reacción química.

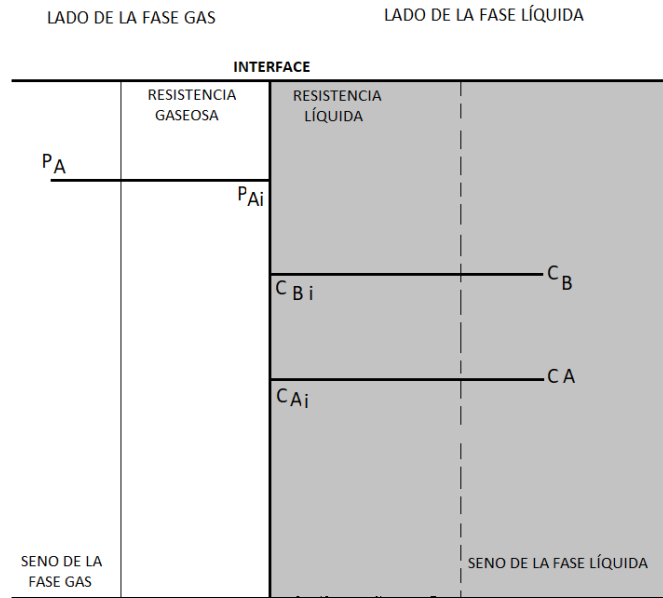


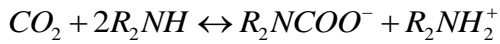
Imagen 19. Caso G. Reacción infinitamente lenta.

$$N_A a = R_A a = \frac{k f_l}{H} P_a C_B = k f_l C_A C_B \quad (3.2.3)$$

2.3 CINÉTICA DE LA REACCIÓN GAS-LÍQUIDO CASO: MONOETANOLAMINA- CO₂

La solución a este trabajo requiere de una cinética para una reacción de segundo orden y reversible que pueda seguir al CO₂ a medida que se difunda. Danckwerts [2] ha propuesto el siguiente análisis de la cinética de reacción para el sistema monoetanolamina-CO₂.

Dada la reacción que se presenta en el sistema:



Debido a que la reacción es reversible se debe considerar la constante de equilibrio K_C

$$K_C = \frac{[CO_2][R_2NH]^2}{[R_2NCOO^-][R_2NH_2^+]} \quad (3.2.4)$$

La velocidad de reacción cuando la reacción es directa, es decir va hacia adelante esta dada por:

$$r_f = K_{AM} [CO_2][R_2NH] \quad (3.2.5)$$

Mientras que la velocidad de reacción inversa o contra reacción es:

$$r_r = K_C [R_2NCOO^-][R_2NH_2^+] = K_{AM} [CO_2][R_2NH] \quad (3.2.6)$$

Donde

K_{AM} es la constante de la amina

Y K_C es la constante del CO₂

En la Ec. 3.2.6 se emplea la constante de equilibrio K_C , esta condición es válida solo en las condiciones de equilibrio [2]

Multiplicando ambos lados la Ec. 3.2.6 por $[R_2NH]$ se llega a:

$$r_r [R_2NH] = K_{AM} [CO_2][R_2NH]^2 \quad (3.2.7)$$

$$[CO_2][R_2NH]^2 = \frac{r_r [R_2NH]}{K_{AM}} \quad (3.2.8)$$

Sustituyendo la Ec. 3.2.8 en la Ec. 3.2.4 se llega a:

$$K_C = \frac{r_r [R_2NH]}{K_{AM} [R_2NCOO^-][R_2NH_2^+]} \quad (3.2.9)$$

Se observa que la Ec. 3.2.9 corresponde a la expresión de la constante de equilibrio en función de la velocidad de reacción inversa o contra reacción.

Por lo tanto la velocidad de reacción inversa puede escribirse como:

$$r_r = \frac{K_C K_{AM} [R_2NCOO^-][R_2NH_2^+]}{[R_2NH]} \quad (3.3)$$

Al tener una reacción reversible, se debe tomar en cuenta la reacción directa y la reacción inversa por lo que se debe plantear una velocidad efectiva que tome en cuenta ambas reacciones.

$$r = r_f - r_r = K_{AM} [CO_2][R_2NH] - \frac{K_C K_{AM} [R_2NCOO^-][R_2NH_2^+]}{[R_2NH]} \quad (3.3.1)$$

Despejando la concentración del CO₂ de la Ec. 3.2.4 se obtiene:

$$[CO_2]_e = \frac{K_C [R_2NCOO^-][R_2NH_2^+]}{[R_2NH]^2} \quad (3.3.2)$$

Multiplicando por $[R_2NH]$ la Ec. 3.3.2 por ambos lados se llega al siguiente arreglo:

$$[CO_2]_e [R_2NH] = \frac{K_C [R_2NCOO^-][R_2NH_2^+]}{[R_2NH]} \quad (3.3.3)$$

Sustituyendo en la Ec. 3.3.1 se llega a:

$$r = r_f - r_r = K_{AM} [CO_2][R_2NH] - K_{AM} [CO_2]_e [R_2NH]$$

Simplificando

$$r = r_f - r_r = K_{AM} [R_2NH] \{ [CO_2] - [CO_2]_e \} \quad (3.3.4)$$

Danckwerts [2] hace mención que la concentración del CO₂ en equilibrio $[CO_2]_e$ es del orden de 10⁻⁵ gmol/cm³ a lo largo de una columna de absorción, por lo que razonablemente la rapidez de reacción puede escribirse como:

$$r = r_f - r_r = K_{AM} [R_2NH][CO_2] \quad (3.3.5)$$

Se observa que la Ec. 3.3.5 es la misma que la Ec. 3.2.5, por lo tanto el efecto de la reacción inversa es despreciable.

Danckwerts [2] también proporciona valores de la constante de reacción para este sistema de estudio que se presentan en la Tabla 1.

AMINA	K _{AM} L/GMOLS
NH ₃	440
MONO ETANOL AMINA	7600
DIETANOL AMINA	1500
MONOISOPROPANOL AMINA	6620
DIISOPROPANOL AMINA	400

Tabla 1. Valores de la constante de reacción K_{AM} a 25°C para diferentes aminas en contacto con CO₂

Si se asume que durante la experimentación la concentración de la monoetanolamina es constante y no cambia sustancialmente puede plantearse una cinética de reacción de pseudo primer orden, por lo tanto la Ec. 3.3.5 puede escribirse como:

$$r = K_{AM} [R_2NH][CO_2] = K' [CO_2] \quad (3.3.6)$$

Donde

$$K' = K_{AM} [R_2NH]$$

De tal manera que la solución a la Ec. 2.6.3 está dada por

$$-D_{AL} \frac{d}{dz}(CO_2) = -K' [CO_2]$$

La solución a esta ecuación se reporta en el apéndice E de este trabajo cuyo resultado es:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{\text{senhb}(1-\zeta)}{\text{senhb}} \quad (3.3.6-1)$$

Donde $\zeta = \frac{z}{L}$

La ecuación anterior está en términos del módulo de Hatta b, si queremos pasar el módulo de Hatta en términos del coeficiente individual de transferencia de masa se supone la siguiente igualdad:

$$b = \sqrt{M_H}$$

$$b = \left(\frac{KL^2}{D_{AB}} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{KL}{\frac{D_{AB}}{L}} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{KL}{KL} \right)^{\frac{1}{2}} D_{AB} = \left(\frac{KLD_{AB}}{KLD_{AB}} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{KD_{AB}}{KL^2} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{KD_{AB}}}{KL}$$

Ahora el módulo de Hatta está en términos del coeficiente de transferencia de masa y de una cinética de reacción de pseudo primer orden.

$$M_H = \frac{\sqrt{D_{AB}KC_B}}{k_L} \quad (3.3.7)$$

Donde $K' = KC_B$

Por lo tanto la Ec.3.3.6-1 puede escribirse

$$C_A = C_{A0} \left[\frac{\sinh \sqrt{M_H} (1-\zeta)}{\sinh \sqrt{M_H}} \right] \quad (3.3.8)$$

2.3.1 GRAFICA VAN- KREVELEN

Van Krevelen y Hoftijzer [14] han publicado una gráfica que relaciona el módulo de Hatta y el factor de mejora para reacciones de pseudo primer orden como se muestra en la imagen 20. El factor de mejora que se obtiene de la lectura en la gráfica depende del Módulo de Hatta y del factor de mejora que se tendría en una reacción instantánea E_i . Para reacciones de pseudo primer orden Van Krevelen y Hoftijzer han proporcionado una solución aproximada.

$$\frac{R_A}{k_L[A^*]} = E = \frac{\left(M_H \frac{E_i - E}{E_i - 1} \right)^{\frac{1}{2}}}{\tanh \left(M_H \frac{E_i - E}{E_i - 1} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (3.3.9)$$

En el cual

$$M_H = \frac{\sqrt{D_{AB}KC_B}}{k_L}$$

$$\text{Factor de mejora instantaneo} = E_i = 1 + \frac{D_B[B^\circ]}{zD_A[A^*]}$$

Donde considera que para que sea una reacción de pseudo primer orden se debe cumplir la siguiente condición

$$\sqrt{D_A k_2 [B^\circ]} < \frac{1}{2} k_L \left(1 + \frac{D_B [B^\circ]}{z D_A [A^*]} \right)$$

En la imagen 19 donde se ha representado en el eje de las abscisas al módulo de Hatta dado por la Ec. 3.3.7, mientras que en el eje de las ordenadas al factor de mejora E, también se observa que se presentan tres zonas, en las cuales se puede ubicar el tipo de reacción que se está llevando a cabo en el fenómeno que se estudia.

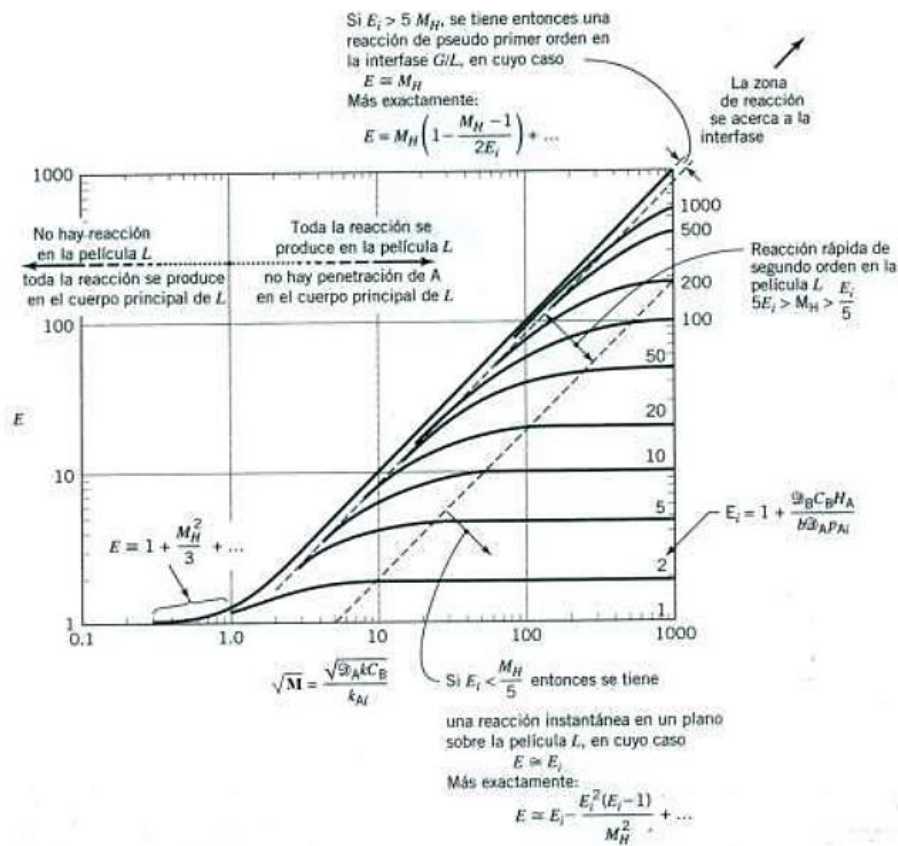


Imagen 20. Grafica de Van Krevelens y Hofstijzer en la que se ha representado el Factor de mejora vs No. de Hatta para una reacción de segundo orden.

- Si el módulo de Hatta $\sqrt{M_H} > 5E_i$ corresponde a una reacción instantánea sobre la película líquida.
- Si $E_i > 5\sqrt{M_H}$ la reacción se encuentra justo en la línea continua de 45° corresponde a la zona de reacción en la interfase, por lo que el módulo de

Hatta y el factor de mejora tienen el mismo valor. $E \cong \sqrt{M_H}$ es decir, se tiene una reacción de pseudo en la interfase gas-liquido.

- Si $5E_i > \sqrt{M_H} > \frac{E_i}{5}$ la reacción es rápida y de segundo orden y se lleva a cabo en la película líquida.

2.4 MODELO DE TRANSFERENCIA DE MASA PROPUESTO: TRANSFERENCIA DE MASA CON REACCIÓN QUÍMICA EN UNA TORRE DE ABSORCIÓN CASO MONOETANOLAMINA-CO₂

En este capítulo se presenta el sistema que se va a estudiar para determinar el efecto de la competencia entre el tiempo de residencia, la difusión y la reacción, para la absorción de dióxido de carbono en monoetanolamina. Para ello se plantearán supuestos que servirán para determinar el problema y así poder describir el modelo matemático que mejor se ajuste al sistema que se pretende estudiar.

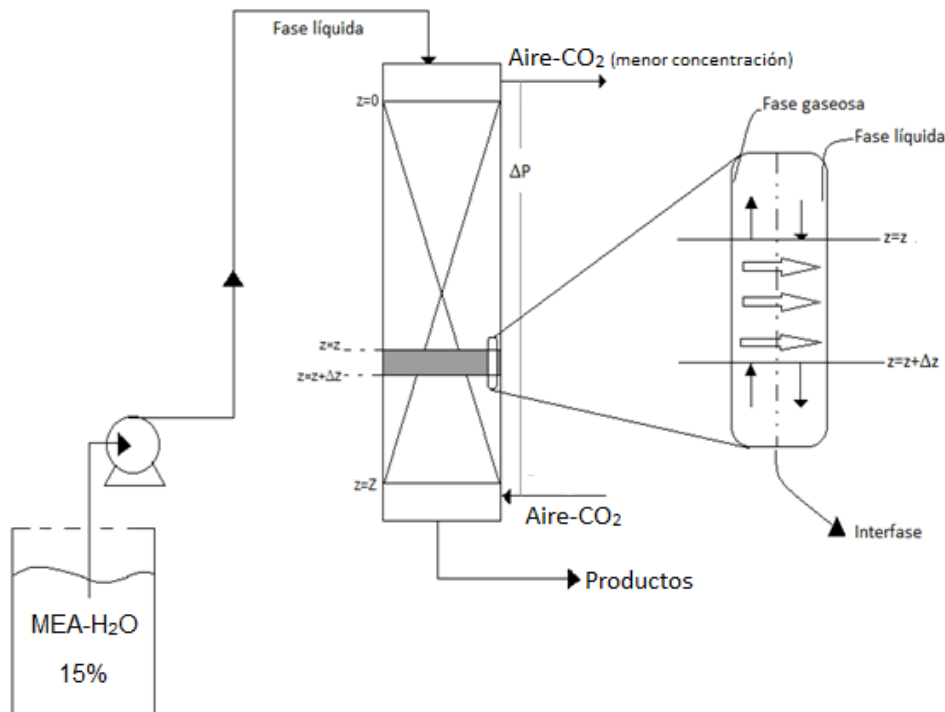


Imagen 21. Sistema de absorción con reacción química.

La imagen 21 representa el sistema, consiste en una columna empacada con anillos Raschig en la cual se ponen en contacto una solución de monoetanolamina con una corriente gaseosa compuesta por aire y dióxido de carbono.

Supuestos

- a) La reacción es homogénea y de pseudo primer orden con respecto al soluto A (CO₂).
- b) La velocidad longitudinal del líquido es constante, esto no es una velocidad radial o angular.
- c) La mezcla radial es perfecta, estos no son gradientes de concentración radial.
- d) La difusión axial es despreciable, en comparación con los efectos axiales convectivos.
- e) La densidad del sistema es prácticamente constante.
- f) La concentración molar volumétrica del gas soluble en la mayor parte del líquido en la columna (A_0) = 0, todo el CO₂ reacciona en la película.
- g) La concentración volumétrica molar del soluto A en la interfaz (A^*) del lado del líquido en equilibrio con la fase gaseosa es la misma en todos los puntos de la columna.
- h) El cambio en la presión parcial del CO₂ mezclado con el aire seco dentro del reactor del absorbedor, es lineal a lo largo de la columna.
- i) No hay flujos molares radiales o angulares en el reactor-absorbedor, solo longitudinal y temporal.
- j) El control de la transferencia de masa reside en la fase líquida.

A partir de la imagen 21 se puede hacer un balance de materia para el CO₂ en la fase líquida en la torre de absorción.

$$\underset{\text{Entrada}}{\mathit{Masa}} - \underset{\text{Salida}}{\mathit{Masa}} + \underset{\text{Generada}}{\mathit{Masa}} = \underset{\text{Acumulada}}{\mathit{Masa}} \quad (3.4)$$

Para la difusión se tiene la ley de Fick descrita en el Capítulo 1

$$J_{Az} = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial z}$$

Para tener un flux total de masa que represente el transporte total, se suman los dos fluxes: el difusivo y el convectivo.

$$\left[\underset{\text{de masa}}{\mathit{Flux total}} \right] = \left[\underset{\text{de masa}}{\mathit{Flux difusivo}} \right] + \left[\underset{\text{de masa}}{\mathit{Flux convectivo}} \right] = -D_{AB} \frac{dC_A}{dz} + L[A_0] \quad (3.4.2)$$

Es necesario convertir el flux en flujo debido a que le balance se hará en unidades de flujo (moles/tiempo). Debido a que la columna esta empacada, se debe considerar el espacio que ocupa dicho empaque, por lo que es necesario multiplicar el área transversal de la columna S por un número, menor de uno, que incluya la fracción del área transversal que este libre para el flujo. Este número se denomina como fracción de huecos ε , y es dependiente del tipo de empaque y arreglo.

Multiplicando el flux por el área del flujo de la torre εS :

$$-D_{AB}(\varepsilon S) \frac{\partial [A_0]}{\partial x} + \varepsilon SL[A_0] \quad (3.4.3)$$

Evaluando la Ec. 3.4.3 cuando $z=z$ se tiene el flujo de masa que entra en el volumen diferencial en la fase líquida:

$$-D_L \varepsilon S \left. \frac{\partial [A_0]}{\partial x} \right|_x + \varepsilon SL[A_0] \Big|_x \quad (3.4.4)$$

Para obtener el flujo de masa que sale del volumen diferencial en la fase líquida, se evalúa la Ec. 3.4.3 en $z = z + \Delta z$

$$-D_L \varepsilon S \left. \frac{\partial [A_0]}{\partial x} \right|_{x+\Delta x} + \varepsilon SL[A_0] \Big|_{x+\Delta x} \quad (3.4.5)$$

Acumulación en el volumen de control

El sistema que se estudia trabaja a régimen dinámico y se necesita un término que justifique el cambio de concentración del CO₂ en la fase líquida después de cierto tiempo, el CO₂ se está acumulando.

$$Acumulación = \frac{\partial [A_0]}{\partial t}$$

El fenómeno de acumulación se da en el volumen de control $\Delta V = S\Delta x$, pero solo en el volumen que no ocupa el empaque ε , la Ec. 3.4.4 se multiplica por el volumen obteniendo el flujo de masa que se acumula en el volumen de control:

$$\varepsilon S \Delta x \frac{\partial [A_0]}{\partial t} \quad (3.4.6)$$

Masa generada debido a la reacción química

Para el sistema MEA-CO₂ donde existe una reacción apreciable debido a que el gas reacciona con la fase líquida.

Un aumento en la velocidad de absorción por reacción es el resultado de una caída de la concentración [A₀] en la fase líquida y, por lo tanto, aumenta la diferencia de concentración. Esto puede considerarse como el principal efecto de reacción:

$$j_A = k_L ([A^*] - [A_0]) = -D_A \left(\frac{d[A]}{dx} \right)_{x=0} \quad (3.4.7)$$

Cuando la velocidad de absorción-reacción R_A a (gmol / cm³ * s) se formula teniendo en cuenta el factor de mejora de la absorción se obtiene:

$$R_A a = Ek_L a ([A^*] - [A_0]) \quad (3.4.8)$$

En el balance se tienen dos términos de reacción:

El término asociado a la transferencia de masa debido a la reacción química está dado por la siguiente ecuación:

$$zR_A a \Delta x S \quad (3.4.9)$$

El término de reacción química, asumiendo que el componente de interés A se consume y multiplicado por el volumen de control está dado por la siguiente ecuación:

$$-r \varepsilon S \Delta x \quad (3.5)$$

Balance de masa en el volumen de control

Ya que se tienen todos los términos necesarios para realizar el balance en el volumen de control de la torre, se sustituyen las ecuaciones (3.4.4, 3.4.5, 3.4.6, 3.4.9, 3.5) en la Ec. 3.4.

$$-D_L \varepsilon S \left. \frac{\partial [A_0]}{\partial x} \right|_x + \varepsilon S L [A_0] \Big|_x + zR_A a \Delta x S = -D_L \varepsilon S \left. \frac{\partial [A_0]}{\partial x} \right|_{x+\Delta x} + \varepsilon S L [A_0] \Big|_{x+\Delta x} + \varepsilon S \Delta x \frac{\partial [A_0]}{\partial t} - r \varepsilon S \Delta x$$

Dividiendo entre el volumen de control (εSΔx) y tomando límites se obtiene

$$L \frac{\partial [A_0]}{\partial x} + \frac{\partial [A_0]}{\partial t} - \frac{zR_A a}{\varepsilon} - r = D_L \frac{\partial^2 [A_0]}{\partial x^2} \quad (3.6)$$

Convección
Acumulación
Absorción con reacción
Reacción
Difusión

El primer término representa el transporte convectivo de masa en la fase líquida, el segundo término representa la acumulación generada en la columna, el tercer término está asociado a la transferencia de masa debido a una reacción química, el cuarto término representa la reacción con un signo negativo que indica que todo A se consume.

2.4.2 SOLUCIÓN DEL MODELO

La transferencia de masa en el sistema de estudio está dada en la dirección radial, por lo que de la Ec.3.6 se considera que no hay acumulación y se desprecian los términos convectivos y difusivos del CO₂ absorbido ambos en la dirección axial, pero existe una reacción apreciable en la película líquida y la velocidad de absorción comparada con la velocidad de reacción es sensiblemente mayor, por lo que la velocidad de absorción química está dada por:

$$-\frac{zR_A a}{\varepsilon} - r = 0 \quad (3.7)$$

El balance diferencial para la amina es:

$$L \frac{\partial [B_0]}{\partial x} = -r \quad (3.7.1)$$

De Ec. 3.7 se puede obtener la expresión de la rapidez de reacción en términos del flux de transferencia de masa:

$$-r = \frac{zR_A a}{\varepsilon} \quad (3.7.2)$$

Por lo tanto

$$L \frac{\partial [B_0]}{\partial x} = \frac{zR_A a}{\varepsilon} \quad (3.7.3)$$

Integrando la Ec.3.7.3 se puede obtener la altura de la torre H en términos de parámetros medibles dentro de la torre

$$L \int_{B_0}^{B_1} d[B_0] = z \frac{R_A a}{\varepsilon} \int_{x=0}^{x=H} dx$$

$$H = \frac{L\varepsilon}{za} \int_{B_0}^{B_1} \frac{d[B_0]}{R_A} \quad (3.7.4)$$

Donde

R_A = Flux de transferencia de masa con reacción química $\frac{gmolA}{cm^2s}$

Z = Coeficiente estequiométrico el cual estará dado por la reacción con un valor de 2.

a = Área interfacial efectiva por unidad de volumen empaquetado $\frac{cm^2}{cm^3}$

L = Flujo de la amina $\frac{g}{cm^2s}$

ε = Fracción de huecos entre el embalaje de la columna de absorción.

$[B_0]$ = Concentración de la amina $\frac{gmol}{L}$

B_0 y B_1 = Concentración de la amina a la entrada y la salida de la torre.

La Ec. 3.7.4 se puede expresar en términos de los coeficientes de transferencia de masa del lado del líquido y del lado del gas:

$$H = \frac{L \varepsilon}{z a} \int_{B_0}^{B_1} \frac{d[B_0]}{pCO_2 \left(\frac{1}{k_g a} + \frac{H}{k_L a E} \right)} \quad (3.8)$$

Si se hace el experimento de transferencia de masa con reacción química en una torre ya construida con altura conocida, siguiendo la concentración de la amina y fijando los parámetros medibles de la Ec.3.8 se puede saber si la cinética es la adecuada o en cuál de los ocho casos mencionados se encuentra nuestro modelo.

CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA DE ANALISIS PROPUESTA

El objetivo de este capítulo es el desarrollo de una secuencia de cálculo que permita estimar la altura de la columna de absorción del Laboratorio de Ingeniería Química. En caso de tener una aproximación razonable, se puede decir que el modelo de transferencia de masa es adecuado y la metodología propuesta podría ser utilizada en otros sistemas.

Esta secuencia pretende estimar la altura necesaria de una columna de absorción para alcanzar la absorción deseada de CO₂, a partir de una corriente de gaseosa compuesta por aire y bióxido de carbono y una corriente líquida de monoetanolamina-agua (MEA-H₂O) al 15% peso. La absorción se llevó a cabo en una columna empacada con anillos Raschig.

1. Realizar un esquema del sistema

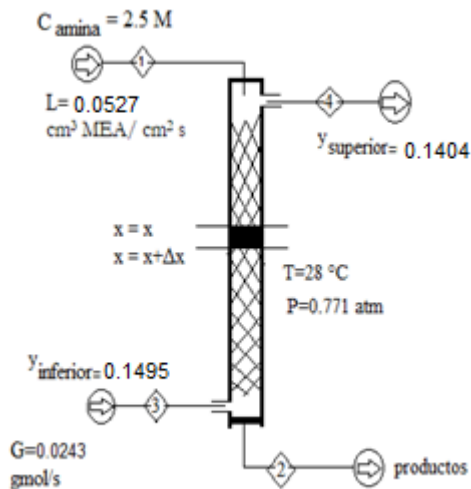


Imagen 22. Columna de absorción empacada.



Características de la columna	
Diámetro interno de la columna	5.08 cm
Área interna de la columna	20.268
Altura	106 cm
Material de construcción	Vidrio
Anillos de vidrio raschig:	
Diámetro interno=	0.545 cm
Diámetro externo=	0.703 cm
Longitud =	0.854 cm
Fracción de huecos $\varepsilon =$	0.723
at=	6.409 cm ² /cm ³

Tabla 2. Características de la torre en la que se llevó a cabo la experimentación

2. DEFINIR CONDICIONES DE OPERACIÓN

Datos experimentales

Flujo de alimentación L/h		Concentración MEA (gmol/L)		Concentración MEA (%masa=gMEA/gsol) %masa=6.064(N)+0.0231	
Temperatura de entrada	21 °C	Entrada	Salida	Entrada	Salida
Flujo de alimentación L/h	3	2.5	0.34	15.18	2.085
	5	2.5	0.39	15.18	2.388
	8	2.5	0.48	15.18	2.933

Tabla 3. Condiciones de entrada y salida de la MEA.

Para el CO ₂		Para el aire		CO ₂ % masa	
Temperatura a la entrada	23 °C	Temperatura de entrada	23 °C	Entrada	Salida
Flujo alimentado mm	36	Flujo alimentado %	20	21.06	19.86
	36		20	21.06	14.45
	36		20	21.06	9.05

Tabla 4. Datos experimentales. Nota: los datos del flujo alimentado del aire y CO₂ se obtuvieron del rotámetro

PM_{CO_2}	$44 \frac{g}{mol}$
PM_{Aire}	$29 \frac{g}{mol}$
$P_{op.}$	0.771 atm
$T_{op.}$	28°C
Factor estequiométrico z	2

La constante de equilibrio de este sistema está dada por:

$$K_c = \frac{[RNH_2]^2 [CO_2]}{[RNHCOO^-][RNH_3^+]} = 9.0 \times 10^{-6} \frac{gmol}{L} \quad [6]$$

La constante de Henry estará dada por:

$$[A^*]/p = 0.025 \frac{gmol}{L \text{ atm}} \quad p_i = H[A^*] \quad H = 40000 \frac{cm^3 atm}{gmolCO_2} \quad [6]$$

Cálculo de la difusividad para el CO₂ y para la MEA

En la imagen 22 se muestra los coeficientes de difusión de etanolaminas en solución acuosa a 25°C, con la cual se puede estimar la difusividad de la MEA a la concentración establecida al inicio. Se debe calcular la relación entre la difusividad de la amina en solución acuosa (que tiene un porcentaje de amina) y la difusividad de la amina en agua pura, con la cual se puede hacer una regla de tres para obtener las difusividades a la temperatura de operación. La difusividad de CO₂ en agua se puede estimar con la imagen 23.

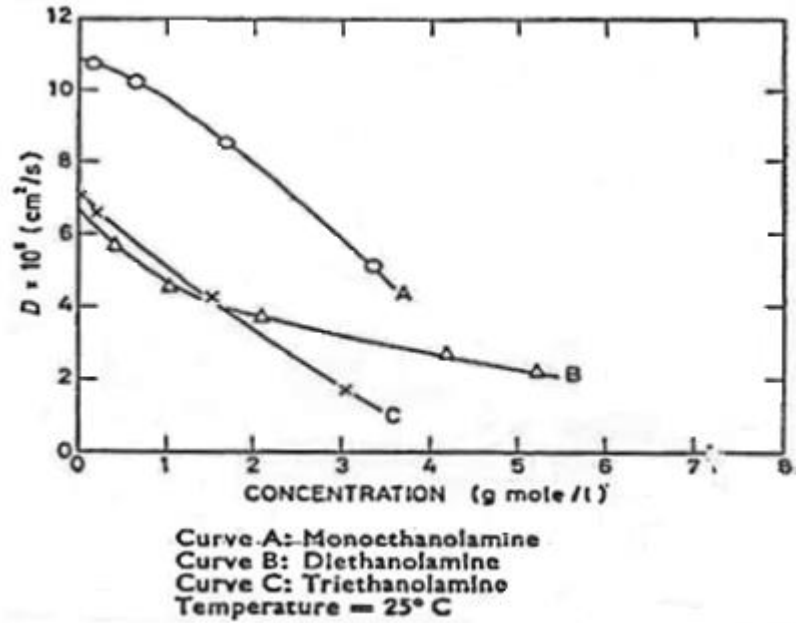


Imagen 23. Difusividad de aminas en agua a 25°C

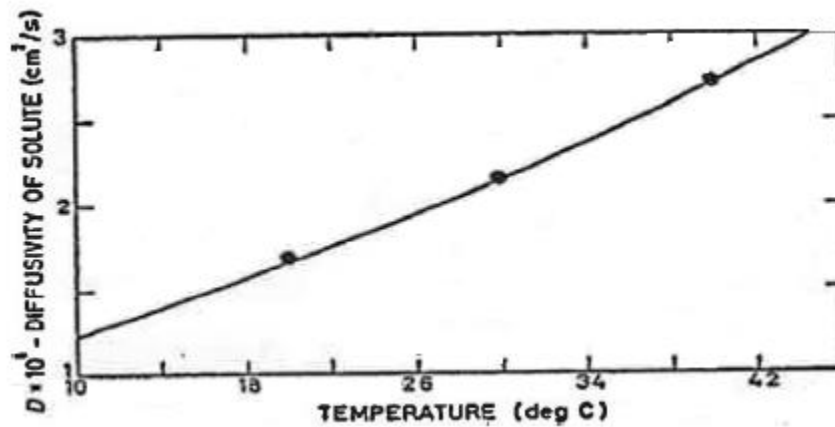


Imagen 24. Difusividad de CO₂ en agua a diferentes temperaturas

$D_{MEA-H_2O} \Big _{2.5M}^{25^\circ C} = 7 \times 10^{-6} \frac{cm^2}{s}$	$D_{MEA-H_2O} \Big ^{2.5^\circ C} = 10.9 \times 10^{-6} \frac{cm^2}{s}$
$D_{CO_2-H_2O} \Big ^{25^\circ C} = 1.69 \times 10^{-5} \frac{cm^2}{s} [11]$	$D_{CO_2-H_2O} \Big ^{28^\circ C} = 1.71 \times 10^{-5} \frac{cm^2}{s} [11]$

Tabla 5. Difusividad de la MEA y el CO₂ a diferente temperatura

$$D_{CO_2}^{28^\circ C} = \frac{D_{MEA-H_2O \text{ a } 2.5M}}{D_{MEA-H_2O \text{ a } 25^\circ C}} \times D_{CO_2-H_2O \text{ a } 28^\circ C} = 1.09 \times 10^{-5} \frac{cm^2}{s}$$

$$D_{MEA}^{28^\circ C} = \frac{D_{MEA-H_2O \text{ a } 2.5M}}{D_{CO_2-H_2O \text{ a } 25^\circ C}} \times D_{CO_2-H_2O \text{ a } 28^\circ C} = 0.708 \times 10^{-5} \frac{cm^2}{s}$$

Para evaluar los flujos obtenidos del rotámetro se deben transformar los valores leídos para Aire y CO₂ con una sencilla regla de tres.

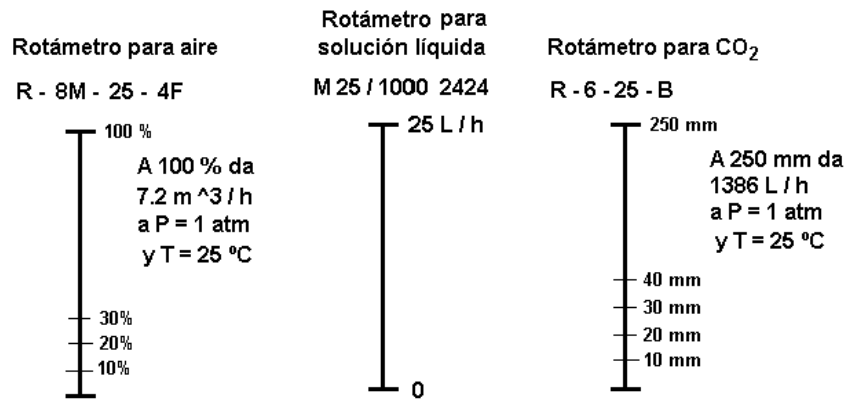


Imagen 25. Método de conversión de flujos obtenidos del rotámetro.

Para el Aire :

$$100\% \rightarrow 7.2 \frac{m^3}{h}$$

$$20\% = 1.44 \frac{m^3}{h}$$

Para el CO₂ :

$$250 \text{ mm} \rightarrow 1386 \frac{L}{h}$$

$$36 \text{ mm} = 199.584 \frac{L}{h}$$

3. Debido a que los valores obtenidos se encuentran en condiciones estándar se debe pasar a condiciones normales del Laboratorio de Ingeniería Química.

$$\frac{P_1 Q_1}{T_1} = \frac{P_2 Q_2}{T_2} \quad (4)$$

Despejando de la Ec.4 Q₂ para saber el Flujo a condiciones del Laboratorio:

Calcular el flujo molar del aire:

$$Q_{2air} = \frac{P_{1es\ tan\ dar} Q_{1airs\ tan} T_{2air}}{T_{1es\ tan\ dar} P_{2Lab}} \quad (4.1)$$

Donde

$$T_{1es\ tan\ dar} = 25^{\circ}C = 298.15K$$

$$T_{2air} = 23^{\circ}C = 296.15K$$

$$P_{1es\ tan\ dar} = 1\ atm \quad P_{2Lab} = 0.771$$

$$Q_{1airs\ tan} = 1.44 \frac{m^3}{h}$$

Sustituyendo:

$$Q_{2air} = \frac{1atm * 1.44 \frac{m^3}{h} 296.15K}{298.15K * 0.771atm} = 1.855 \frac{m^3}{h}$$

Necesitamos en Flujo de aire en gmolAire/s por lo que se necesita calcular la densidad del aire:

$$\rho_{air} = -0.0035T^{\circ}C + 1.2791 \frac{kg}{m^3} \quad (4.1.1)$$

$$\rho_{air} = -0.0035(23^{\circ}C) + 1.2791 = 1.199 \frac{kg}{m^3}$$

$$G_{aire} = 1.855 \frac{m^3}{h} * 1.199 \frac{kg}{m^3} * \frac{1kgmol}{29kg} * \frac{1000gmol}{1kgmol} * \frac{1h}{3600s}$$

$$G_{aireE} = 0.0213 \frac{gmolaire}{s}$$

Calcular el flujo molar del CO₂:

$$Q_{2CO_2} = \frac{P_{1es\ tan\ dar} Q_{1CO_2s\ tan} T_{2CO_2}}{T_{1es\ tan\ dar} P_{2Lab}}$$

Donde

$$T_{1\text{estandar}} = 25^{\circ}\text{C} = 298.15\text{K}$$

$$T_{2\text{CO}_2} = 23^{\circ}\text{C} = 296.15\text{K}$$

$$P_{1\text{estandar}} = 1\text{ atm} \quad P_{2\text{Lab}} = 0.771$$

$$Q_{1\text{CO}_2\text{stan}} = 199.584 \frac{\text{L}}{\text{h}}$$

Sustituyendo:

$$Q_{2\text{air}} = \frac{1\text{atm} * 199.584 \frac{\text{L}}{\text{h}} * 296.15\text{K}}{298.15\text{K} * 0.771\text{atm}} = 257.12 \frac{\text{L}}{\text{h}}$$

$$\rho_{\text{CO}_2} = -0.0053T^{\circ}\text{C} + 1.9547 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \tag{4.1.2}$$

$$\rho_{\text{CO}_2} = -0.0053(23^{\circ}\text{C}) + 1.9547 = 1.833 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$G_{\text{CO}_2} = 257.12 \frac{\text{L}}{\text{h}} * \frac{1}{1000} * 1.833 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} * \frac{1\text{kgmolCO}_2}{44\text{kgCO}_2} * \frac{1000\text{gmol}}{\text{kgmol}} * \frac{1\text{h}}{3600\text{s}}$$

$$G_{\text{CO}_2\text{E}} = 0.002975 \frac{\text{gmolCO}_2}{\text{s}}$$

4. Calcular el flujo molar de mezcla gaseosa alimentada en gmol/s

Teniendo los flujos molares del aire y del CO₂ que entran a la torre se obtiene el flujo molar total de la mezcla gaseosa.

$$G_{\text{molarmezcla}} = G_{\text{aireE}} + G_{\text{CO}_2\text{E}} \tag{4.1.3}$$

$$G_{\text{molarmezcla}} = 0.0243 \frac{\text{gmolmezcla}}{\text{s}}$$

5. Calcular la fracción molar del CO₂ a la entrada

Para obtener la fracción molar del CO₂ de la tabla de datos tenemos el porcentaje en masa obtenido por cromatografía:

Fracción peso de CO₂

$$wCO_2 = \frac{\% w CO_2 E}{100} \quad (4.1.4)$$

Donde $\% w CO_2 E \Rightarrow \frac{21.06}{21.06}$

$$y_{molarCO_2E} = \frac{\frac{wCO_2 E}{PM_{CO_2}}}{\frac{wCO_2 E}{PM_{CO_2}} + \frac{(1-wCO_2 E)}{PM_{aire}}} \quad (4.1.5)$$

$$y_{molarCO_2E} = 0.1495 \frac{gmolCO_2}{gmolmezcla}$$

$$y_{molarAireE} = 1 - y_{molarCO_2E} \quad (4.1.6)$$

$$y_{molarAireE} = 0.8505 \frac{gmolAire}{gmolmezcla}$$

6. La densidad de la mezcla líquida alimentada

Densidad de la mezcla MEA-AGUA al 15% en peso

$$\rho_{MEA-H_2O} = 0.0007(T^\circ C)^2 - 0.5498T^\circ C + 1016.3 \frac{kg}{m^3} \quad (4.1.7)$$

$$\rho_{MEA-H_2O} = 1.005 \times 10^3 \frac{kg}{m^3}$$

$$\rho_{MEA-H_2O} = 1.005 \times 10^3 \frac{kg}{m^3} * \frac{1000g}{1kg} * \frac{1m^3}{1000L} * \frac{1L}{1000cm^3}$$

$$\rho_{MEA-H_2O} = 1.005 \frac{g}{cm^3}$$

7. La fracción molar a la salida en el domo de la columna

Cuando el Flujo de alimentación es 3 L/h

$$\% wCO_{2s} = 19.86$$

Concentración en % en peso de aire a la salida

$$\% w_{AireS} = 100 - \% w_{CO_2s} \quad (4.1.8)$$

$$\% w_{AireS} = 80.14$$

$$y_{d\ CO_2} = \frac{\frac{\% w_{CO_2S}}{PM_{CO_2}}}{\frac{\% w_{CO_2S}}{PM_{CO_2}} + \frac{\% w_{AireS}}{PM_{Aire}}} \quad (4.1.9)$$

$$y_{d\ CO_2} = 0.1404 \frac{gmol_{CO_2}}{gmol_{mezcla}}$$

8. Calcular el peso molecular de mezcla gaseosa

$$PM_{MezclaGaseosa} = (c_{aire} * PM_{Aire}) + (c_{CO_2} * PM_{CO_2})$$

Donde (4.2)

c_{aire} y c_{CO_2} son las composiciones de los elementos que componen la mezcla de gas

$$PM_{MezclaGaseosa} = (0.8505 * 29\ g / gmol) + (0.1495 * 44\ g / gmol) = 31.24\ g / gmol$$

9. Calcular el Flujo de solución alimentado MEA-H₂O

Teniendo el área transversal de flujo calculado anteriormente, se puede calcular el

flujo de solución en $\frac{cm^3}{cm^2s}$

Flujo de alimentación de MEA – H ₂ O	Área transversal de flujo
$3 \frac{L}{h}$	$ATF = 15.809\ cm^2$

$$L = 3 \frac{L}{h} * \frac{1h}{3600s} * \frac{1000cm^3}{1L} * \frac{1}{ATF}$$

$$L = 0.0527 \frac{cm^3}{cm^2s}$$

10. Calcular la masa velocidad del líquido

Teniendo la densidad y el flujo de solución del líquido se puede calcular la masa velocidad del líquido:

$$\text{Masa velocidad del líquido} = L * \rho_{MEA}$$

$$\text{Masa vel. del líquido} = 0.053 \frac{g}{cm^2 s}$$

La masa velocidad del líquido se necesitará en unidades inglés para cálculos futuros:

$$0.053 \frac{g}{cm^2 s} * \frac{1lb}{453.6g} * \frac{929.03cm^2}{1ft^2} * \frac{3600s}{1h}$$

$$\text{Masa vel. del líquido} = 390.7 \frac{lb}{hft^2}$$

11. Cálculo del punto seleccionado en la columna

Teniendo las fracciones molares en el fondo y en el domo de la columna, se hace una distribución de puntos a lo largo de la columna.

$$y_{fCO_2} = 0.1495$$

$$y_{dCO_2} = 0.1404$$

$$y_{CO_2} = \begin{bmatrix} 0.1495 \\ 0.1477 \\ 0.1459 \\ 0.144 \\ 0.1422 \\ 0.1404 \end{bmatrix}$$

12. Presión parcial del CO₂ en el punto seleccionado

$$P_{CO_2} = m * P_{op} \quad P_{CO_2} = \begin{bmatrix} 0.115 \\ 0.114 \\ 0.112 \\ 0.111 \\ 0.11 \\ 0.108 \end{bmatrix} atm \quad (4.2.1)$$

13. Calcular la relación mol de CO₂/Aire en el punto seleccionado

$$Y_{CO_2} = \frac{y_{CO_2}}{1 - y_{CO_2}} \quad Y_{CO_2} = \begin{bmatrix} 0.176 \\ 0.173 \\ 0.171 \\ 0.168 \\ 0.166 \\ 0.163 \end{bmatrix} \frac{gmolCO_2}{gmolmezcla * inertes} \quad (4.2.2)$$

14. Calcular el flujo de inertes

$$G_{inertes} = G_{molarmezcla} * y_{aire} \quad (4.2.3)$$

$$G_{inertes} = 0.0243 \frac{gmolmezcla}{s} * 0.8505 \frac{gmolinertes}{gmolmezcla}$$

$$G_{inertes} = 0.021 \frac{gmolinertes}{s}$$

15. Calcular el flujo de CO₂ en los puntos distribuidos de la columna

$$G_{CO_2 en el punto} = Y_{CO_2} * G_{inertes} \quad (4.2.4)$$

$$G_{CO_2 \text{ en el punto}} = \begin{bmatrix} 3.624 \times 10^{-3} \\ 3.573 \times 10^{-3} \\ 3.522 \times 10^{-3} \\ 3.468 \times 10^{-3} \\ 3.418 \times 10^{-3} \\ 3.368 \times 10^{-3} \end{bmatrix} \frac{gmolCO_2}{s} \quad G_{CO_2 \text{ en el domo}} = 3.368 \times 10^{-3} \frac{gmolCO_2}{s}$$

16. Calcular el CO₂ absorbido

Se obtiene restando el flujo de CO₂ en el punto seleccionado menos el flujo de CO₂ a la salida (domo).

$$G_{CO_2abs} = G_{CO_2 \text{ en el punto}} - G_{CO_2 \text{ en el domo}} \quad (4.2.5)$$

$$G_{CO_2abs} = \begin{bmatrix} 2.566 \times 10^{-4} \\ 2.054 \times 10^{-4} \\ 1.545 \times 10^{-4} \\ 1.009 \times 10^{-4} \\ 5.033 \times 10^{-5} \\ 0 \end{bmatrix} \frac{gmolCO_2}{s}$$

17. Calcular el área de la columna

$$A_{columna} = \pi \left(\frac{D_{columna}}{2} \right)^2 \quad A_{columna} = 2.027 \times 10^{-3} \text{ m}^2$$

18. Calcular la concentración de amina sin reaccionar en los puntos distribuidos en la columna.

$$C_B = 2.5 - \frac{2 \text{ gmolMEA}}{1 \text{ gmolCO}_2} * \frac{1}{L} * \frac{1000 \text{ cm}^3}{1L} * \frac{1}{A_{\text{columna}} \left(\frac{100 \text{ cm}}{1 \text{ m}} \right)^2} = \frac{\text{gmolMEA}}{L} \quad (4.2.6)$$

$$[B] = \begin{bmatrix} 2.019 \\ 2.115 \\ 2.211 \\ 2.311 \\ 2.406 \\ 2.5 \end{bmatrix} \frac{\text{gmolMEA}}{L} \quad [B] = \begin{bmatrix} 2.019 \times 10^{-3} \\ 2.115 \times 10^{-3} \\ 2.211 \times 10^{-3} \\ 2.311 \times 10^{-3} \\ 2.406 \times 10^{-3} \\ 2.5 \times 10^{-3} \end{bmatrix} \frac{\text{gmolMEA}}{m^3}$$

19. Calcular la masa velocidad del gas en el punto seleccionado

$$y_{N_2} = 0.811 \frac{\text{gmolN}_2}{\text{gmol de inertes}}$$

$$y_{O_2} = 0.189 \frac{\text{gmolO}_2}{\text{gmol de inertes}}$$

$$G_{N_2} = G_{\text{inertes}} y_{N_2} PM_{N_2} = 0.468 \frac{\text{g N}_2}{\text{s}}$$

$$G_{O_2} = G_{\text{inertes}} y_{O_2} PM_{O_2} = 0.124 \frac{\text{g O}_2}{\text{s}}$$

$$G_{CO_2} = G_{\text{inertes}} Y_{CO_2} PM_{CO_2}$$

$$G_{CO_2} = \begin{bmatrix} 0.159 \\ 0.157 \\ 0.155 \\ 0.153 \\ 0.15 \\ 0.148 \end{bmatrix} \frac{\text{g CO}_2}{\text{s}}$$

La masa velocidad del gas en los puntos distribuidos en la columna se calcula:

$$G = G_{CO_2} + G_{N_2} + G_{O_2} \quad (4.2.7)$$

$$G = \begin{bmatrix} 0.752 \\ 0.75 \\ 0.748 \\ 0.745 \\ 0.743 \\ 0.741 \end{bmatrix} \frac{\text{g de mezcla gaseosa}}{\text{s}} \quad G = \begin{bmatrix} 273.687 \\ 272.868 \\ 272.052 \\ 271.194 \\ 270.385 \\ 269.579 \end{bmatrix} \frac{\text{lb}}{\text{hft}^2}$$

20. Calcular el coeficiente de transferencia de masa del lado del gas $k_G a$: Para estimar este valor utilizaremos la correlación desarrollada para Norman[12] usando los módulos de Schmidt para el amoniaco-aire y CO₂-aire, donde las unidades están en el sistema inglés:

$$k_G a = 0.0142 G^{0.72} L^{0.38} \left(\frac{N_{sc_1}}{N_{sc_2}} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{P_{op}} \quad (4.2.8)$$

$$k_G a = 0.0142 G^{0.72} \left(390.7 \frac{\text{lb}}{\text{hft}^2} \right)^{0.38} \left(\frac{0.691}{0.858} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{0.771 \text{ atm}} = \frac{\text{lbmol}}{\text{hft}^3 \text{ atm}}$$

Necesitamos pasar las unidades de $k_G a$ a $\frac{\text{gmolCO}_2}{\text{s cm}^3 \text{ atm}}$ por lo que el factor de conversión es:

$$k_G a \frac{\text{g}}{\text{cm}^2 \text{ s}} * \frac{453.6 \text{ g}}{1 \text{ lb}} * \frac{1 \text{ ft}^3}{28316.8 \text{ cm}^3} * \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} \quad k_G a = \begin{bmatrix} 3.895 \times 10^{-5} \\ 3.887 \times 10^{-5} \\ 3.878 \times 10^{-5} \\ 3.87 \times 10^{-5} \\ 3.861 \times 10^{-5} \\ 3.853 \times 10^{-5} \end{bmatrix} \frac{\text{gmolCO}_2}{\text{s cm}^3 \text{ atm}}$$

21. Para estimar el área interfacial efectiva por unidad de volumen empaquetado, Danckwerst [6] propone la siguiente ecuación:

$$\frac{a}{at} = 1 - \exp \left\{ -1.45 \left(\frac{\sigma_c}{\sigma_L} \right)^{0.75} \left(\frac{L}{at\mu_L} \right)^{0.1} \left(\frac{L^2 at}{\rho_G^2} \right)^{-0.05} \left(\frac{L^2}{\rho_L \sigma at} \right)^{0.2} \right\}$$

Donde

$$L = 0.053 \frac{cm^3}{cm^2 s}$$

$$at = 6.409 \frac{cm^2}{cm^3}$$

$$D_A = 1.098 \times 10^{-5} \frac{cm^2}{s}$$

$$\rho_L = 1.005 \frac{g}{cm^3}$$

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_L} = 0.85$$

$$\mu_L = 0.02 \frac{g}{cm s}$$

$$g = 977.93 \frac{cm}{s^2}$$

$$\rho_G = 9.9 \times 10^{-4} \frac{g}{cm^3}$$

$$\therefore a = 0.693 \frac{1}{cm}$$

Teniendo el área interfacial efectiva se puede calcular el coeficiente de transferencia de masa de lado del líquido

$$k_L \left(\frac{\rho_L}{\mu_L g} \right)^{\frac{1}{3}} = 0.0051 \left(\frac{L}{a\mu_L} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{\mu_L}{\rho D_A} \right)^{-\frac{1}{2}} (atd)^{0.4} \quad (4.2.9)$$

$$\therefore k_L = 0.003161 \frac{cm}{s}$$

22. Calcular la concentración de CO₂ en los puntos distribuidos en la columna

$$[A] = 0.025 \frac{\text{gmolCO}_2}{\text{L atm}} p_{\text{CO}_2} \quad [A] = \begin{bmatrix} 2.882 \times 10^{-3} \\ 2.847 \times 10^{-3} \\ 2.812 \times 10^{-3} \\ 2.776 \times 10^{-3} \\ 2.741 \times 10^{-3} \\ 2.706 \times 10^{-3} \end{bmatrix} \frac{\text{gmolCO}_2}{\text{L}} \quad (4.3)$$

23. Para calcular el factor de mejora se tienen que calcular previamente el factor de mejora instantáneo el cual es un número adimensional

$$E_i = \left(1 + \frac{D_B[B]}{zD_A[A]} \right) \quad E_i = \begin{pmatrix} 228.603 \\ 242.313 \\ 256.314 \\ 271.422 \\ 286.059 \\ 301.024 \end{pmatrix} \quad (4.3.1)$$

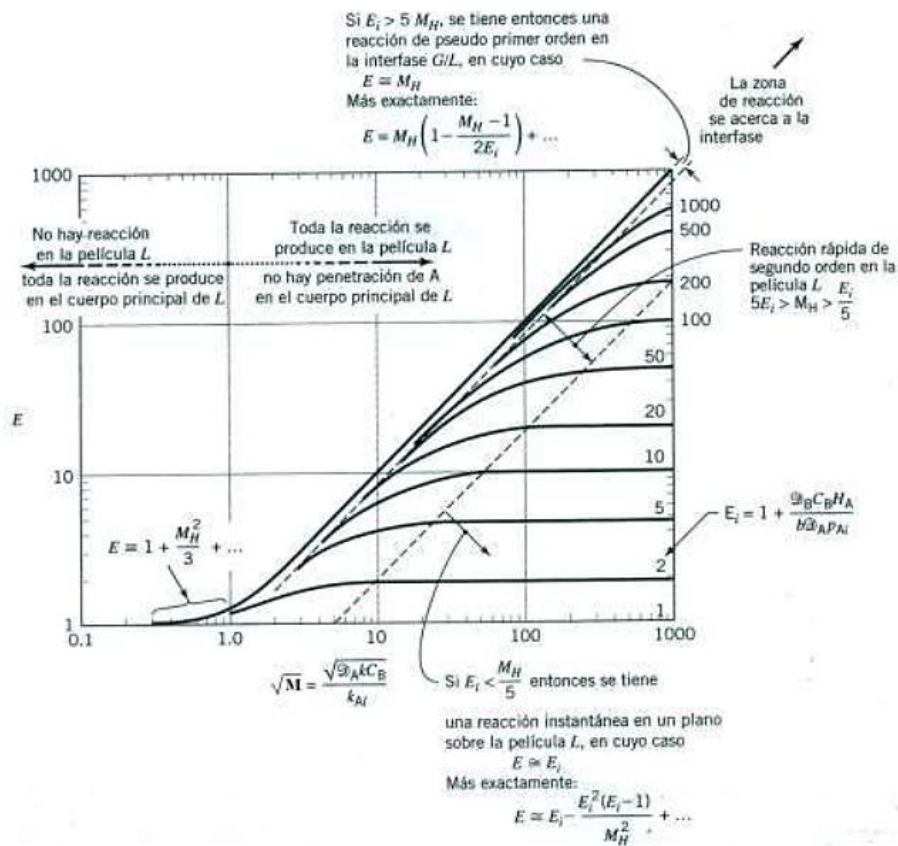
El factor de mejora se puede calcular con la siguiente fórmula propuesta por Danchwerts [6]

$$E = \left[\left(\frac{1}{\frac{1}{(E_i - 1)^{1.35}} + \frac{1}{(E_i - 1)^{1.35}}} \right)^{1.35} + 1 \right] \quad E = \begin{bmatrix} 11.372 \\ 11.591 \\ 11.804 \\ 12.024 \\ 12.227 \\ 12.425 \end{bmatrix} \quad (4.3.2)$$

24. Se debe calcular el número de Hatta para el siguiente paso

$$\sqrt{M} = \frac{\sqrt{D_A k_2 [B]}}{k_L} \quad \sqrt{M} = \begin{bmatrix} 149.902 \\ 153.419 \\ 156.842 \\ 160.362 \\ 163.612 \\ 166.786 \end{bmatrix} \quad (4.3.3)$$

25. De acuerdo con los criterios de la gráfica de Van Krevelens y Hofstijzer [10] podemos ubicarnos en la zona en la que se está llevando a cabo la reacción en nuestro sistema.



- Si el módulo de Hatta $\sqrt{M_H} > 5E_i$ corresponde a una reacción instantánea sobre la película líquida.

$$\sqrt{M} = \begin{bmatrix} 149.902 \\ 153.419 \\ 156.842 \\ 160.362 \\ 163.612 \\ 166.786 \end{bmatrix} > 5E_i = \begin{bmatrix} 1.143 \times 10^3 \\ 1.212 \times 10^3 \\ 1.282 \times 10^3 \\ 1.357 \times 10^3 \\ 1.43 \times 10^3 \\ 1.505 \times 10^3 \end{bmatrix} \quad \text{No cumple}$$

- Si $E_i > 5\sqrt{M_H}$ la reacción se encuentra justo en la línea continua de 45° corresponde a la zona de reacción en la interfase, por lo que el módulo de Hatta y el factor de mejora tienen el mismo valor. $E \cong \sqrt{M_H}$ es decir, se tiene una reacción de pseudo en la interfase gas-liquido.

$$E_i = \begin{bmatrix} 228.603 \\ 242.313 \\ 256.314 \\ 271.422 \\ 286.059 \\ 301.024 \end{bmatrix} > 5\sqrt{M} = \begin{bmatrix} 749.51 \\ 767.093 \\ 784.211 \\ 801.808 \\ 818.059 \\ 833.929 \end{bmatrix} \quad \text{No cumple}$$

- Si $5E_i > \sqrt{M_H} > \frac{E_i}{5}$ la reacción es rápida y de segundo orden y se lleva a cabo en la película líquida.

$$5E_i = \begin{bmatrix} 1.143 \times 10^3 \\ 1.212 \times 10^3 \\ 1.282 \times 10^3 \\ 1.357 \times 10^3 \\ 1.43 \times 10^3 \\ 1.505 \times 10^3 \end{bmatrix} > \sqrt{M} = \begin{bmatrix} 149.902 \\ 153.419 \\ 156.842 \\ 160.362 \\ 163.612 \\ 166.786 \end{bmatrix} > \frac{E_i}{5} = \begin{bmatrix} 45.721 \\ 48.463 \\ 51.263 \\ 54.284 \\ 57.212 \\ 60.205 \end{bmatrix}$$

Si se cumple, por lo tanto la reacción es rápida y puede tomarse como pseudo primer orden, donde el factor de mejora se encuentra cercano a la línea continua de 45°, es decir; la reacción ocurre en las cercanías de la interfase.

26. Calcular el flux de transferencia de masa del CO₂ en los puntos seleccionados en la columna

$$R_A = \left(\frac{p_{CO_2}}{\frac{1}{k_G a} + \frac{H}{E k_L a}} \right) \frac{1}{a} \quad R_A = \begin{bmatrix} 1.02 \times 10^{-7} \\ 1.026 \times 10^{-7} \\ 1.032 \times 10^{-7} \\ 1.037 \times 10^{-7} \\ 1.041 \times 10^{-7} \\ 1.044 \times 10^{-7} \end{bmatrix} \frac{gmolCO_2}{cm^2 s} \quad (4.3.4)$$

27. Calcular la altura de la torre

$$H = \frac{L\varepsilon}{za} \int_{[B]_{fondo}}^{[B]_{domo}} \frac{1}{R_A} d[B] \quad (4.3.5)$$

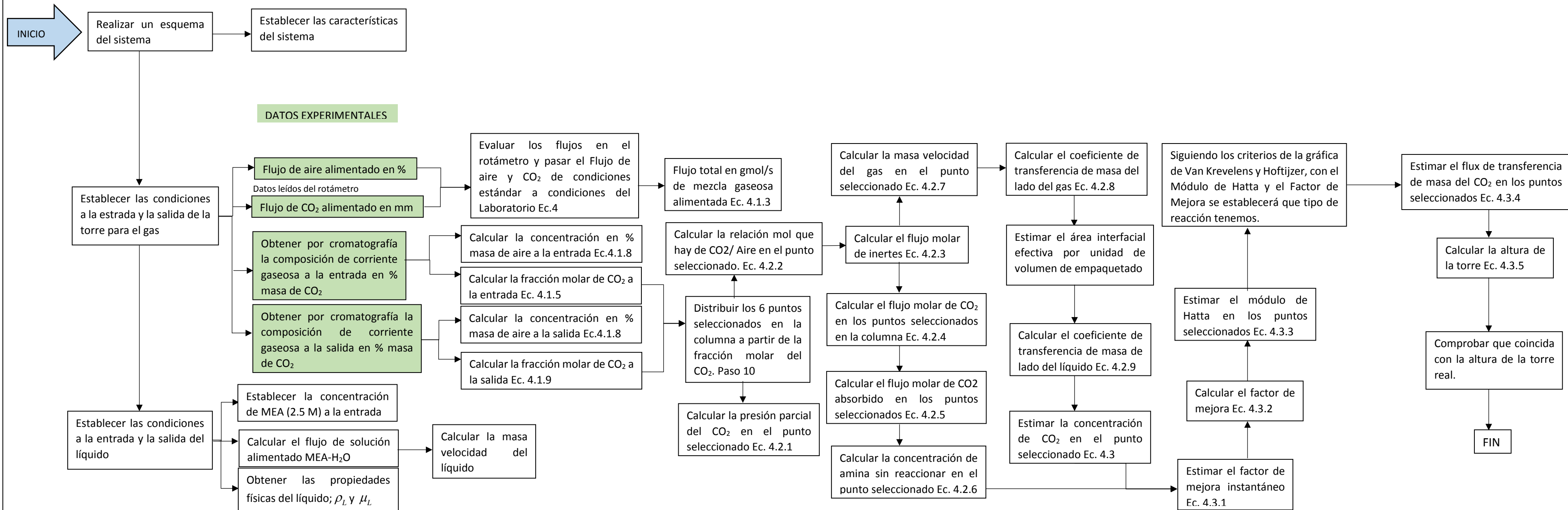
$[B] \frac{gmolMEA}{cm^3}$	$R_A \frac{gmolCO_2}{cm^2 s}$	$\frac{1}{R_A} \frac{cm^2 s}{gmolCO_2}$	$\left(\frac{1}{R_A} \right)_{media}$	$\Delta[B] \frac{gmolMEA}{cm^3}$	<i>Integral</i>
2.019×10^{-3}	1.02×10^{-7}	9.808×10^6			938.496
2.115×10^{-3}	1.026×10^{-7}	9.743×10^6	9.776×10^6	9.6×10^{-5}	932.73
2.211×10^{-3}	1.032×10^{-7}	9.689×10^6	9.716×10^6	9.6×10^{-5}	966.5
2.311×10^{-3}	1.037×10^{-7}	9.641×10^6	9.665×10^6	1×10^{-4}	914.09
2.406×10^{-3}	1.041×10^{-7}	9.604×10^6	9.622×10^6	9.5×10^{-5}	901.366
2.5×10^{-3}	1.044×10^{-7}	9.575×10^6	9.589×10^6	9.4×10^{-5}	$\sum = 4653.182 \frac{s}{cm}$

Tabla 6. Resultados obtenidos a partir de la metodología propuesta

La altura de la torre obtenida para la primera corrida con un flujo de alimentación de 3 L/h es: $H = 1.27 \text{ m}$

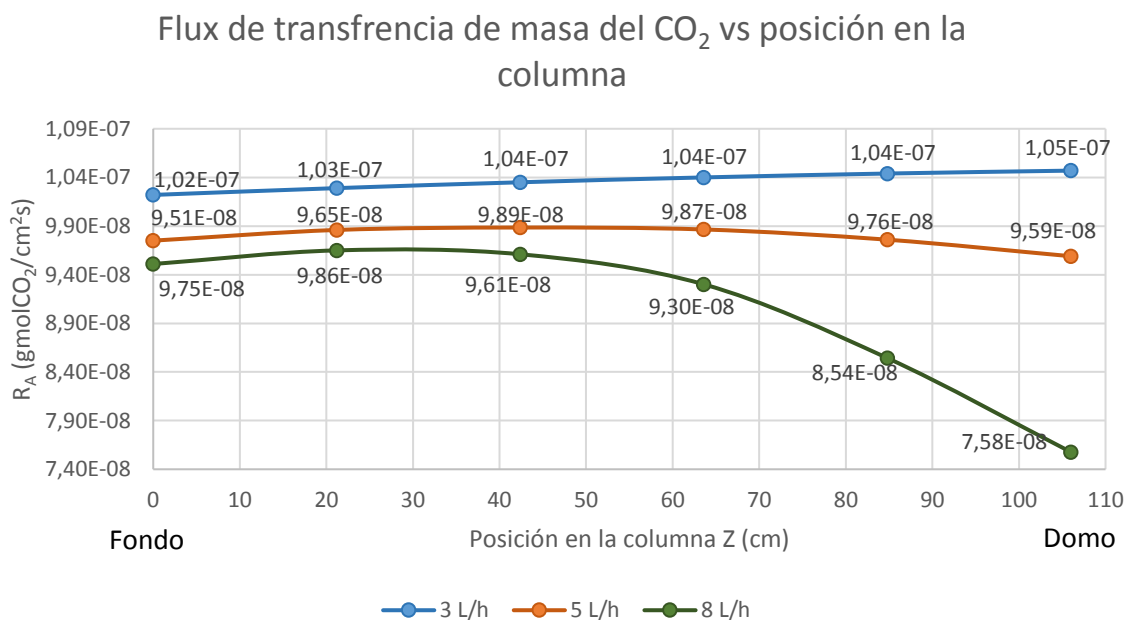
Se ha calculado la altura de la torre con datos experimentales reales, siguiendo la metodología propuesta se obtuvo una altura de 1.27 m y se puede comparar con la altura real de la torre que es de 1.06 m, obteniendo un porcentaje de error de 19.81%

DIAGRAMA DE BLOQUES PARA EL CÁLCULO DE LA ALTURA DE UNA TORRE DE ABSORCIÓN CON LA METODOLOGIA PROPUESTA



CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se realizaron tres corridas con diferentes flujos de alimentación, por lo que se elaboró una gráfica del comportamiento del flux de transferencia de masa del CO₂ contra la posición en la columna de absorción. El flujo de CO₂ se mantuvo constante durante las tres experimentaciones de tal manera que solo se está analizando el efecto de la variación del flujo de la MEA.



Gráfica 1. Representación gráfica del comportamiento del flux de transferencia de masa del CO₂ a diferentes flujos de alimentación de monoetanolamina.

El análisis de la gráfica iniciará de derecha a izquierda, desde el domo de la columna que corresponde a la parte donde entra la MEA hasta el fondo de la columna que corresponde a la entrada de CO₂. Las tres curvas parten del domo de la columna con una misma concentración de MEA y la reacción comienza en el domo de la columna.

En la curva azul que corresponde al flujo de alimentación 3 L/h de MEA, en z =106 cm se obtuvo un flux de transferencia de masa del CO₂ de 1.05x10⁻⁷ g/molCO₂/cm²s, a medida que nos alejamos del domo de la columna el flux de transferencia de masa aumenta hasta alcanzar un máximo a 63.6 cm de la base de la columna con R_A=1.04x10⁻⁷ g/molCO₂/cm²s, posteriormente el flux de transferencia de masa comienza a disminuir hasta llegar al fondo de la columna en z =0 cm con un flux de transferencia de masa de 1.02x10⁻⁷ g/molCO₂/cm²s debido a que en el fondo la

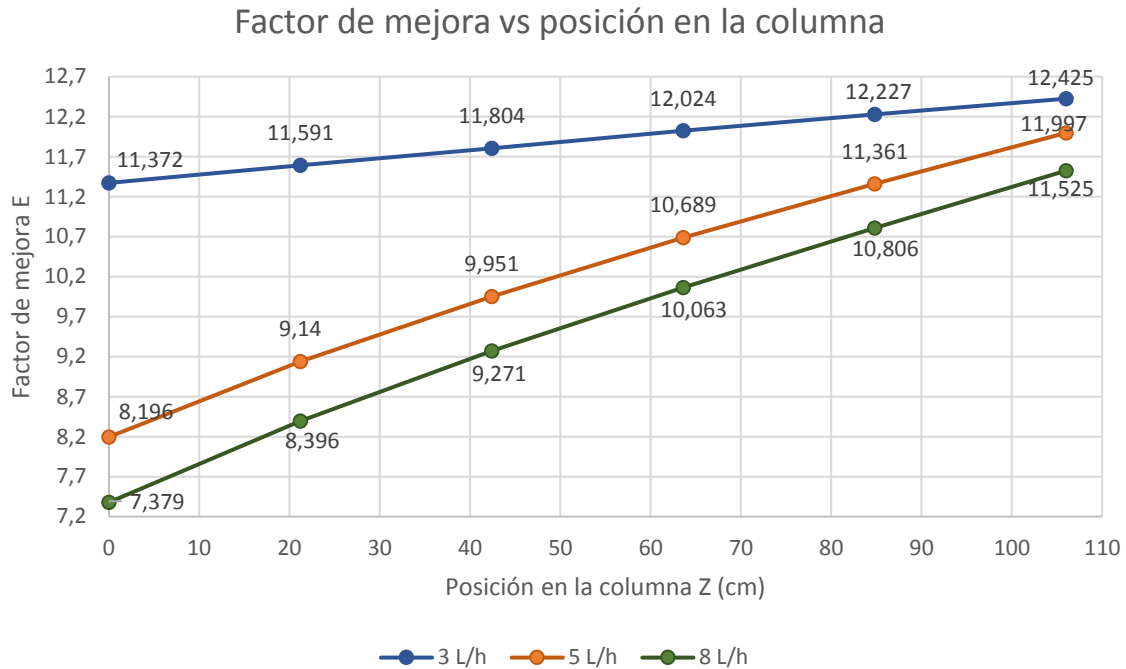
concentración de MEA es menor y una concentración más alta de CO₂ sin reaccionar.

Al incrementar el flujo de alimentación a 5 L/h de MEA (curva naranja) el flux de transferencia de masa disminuye en relación al flux de transferencia de masa obtenidos en el flujo 3 L/h (curva azul), esto se debe a que el tiempo de residencia es menor en el flujo más grande. En el domo de la columna en $z=106$ cm se obtuvo un flux de transferencia de masa del CO₂ de 9.59×10^{-8} gmolCO₂/cm²s y va aumentando a medida que se acerca al fondo de la columna hasta alcanzar un máximo de 9.89×10^{-8} gmolCO₂/cm²s en $z=42.4$ cm, posteriormente comienza a disminuir hasta llegar al fondo de la columna en $z=0$ cm con un valor del flux de transferencia de masa igual a 9.51×10^{-8} gmolCO₂/cm²s.

Al incrementar el flujo de alimentación a 8 L/h de MEA (curva verde), se observa como el flux de transferencia de masa está por debajo de las dos curvas de flujos menores, porque el tiempo de residencia es menor, de igual manera el flux de transferencia de masa incrementa desde el domo de la columna hasta alcanzar un máximo en $z=21.2$ cm con un $R_A=9.86 \times 10^{-8}$ gmolCO₂/cm²s, posteriormente el flux de transferencia de masa disminuye a 9.75×10^{-8} gmolCO₂/cm²s en $z=0$.

En conclusión a lo observado en la gráfica 1, a flujos pequeños el flux de transferencia de masa incrementa debido al efecto del tiempo de residencia, es decir, hay mayor contacto directo entre la MEA y el CO₂, por lo tanto, no es conveniente incrementar el flujo ya que la velocidad de reacción disminuye, debido que a mayor flujo el tiempo de residencia disminuye.

Adicionalmente se representa gráficamente el factor de mejora contra la posición en la columna para los tres flujos de alimentación. El análisis de esta grafica iniciará igual que en la gráfica anterior, de derecha a izquierda, desde el domo de la columna que corresponde a la parte donde entra la MEA hasta el fondo de la columna que corresponde a la entrada de CO₂.



Gráfica 2. Representación gráfica del comportamiento del Factor de mejora a lo largo de la columna de absorción, a diferentes flujos.

En la gráfica 2 se observa que a medida que la MEA va descendiendo desde el domo hasta el fondo de la columna el factor de mejor disminuye, también se puede ver que a flujos de alimentación menores el factor de mejora es mayor. Se observa que a menor flujo se obtuvo un factor de mejora de 12.425, es decir, la reacción se ha favorecido en 12.425 en relación a una absorción física sin reacción química.

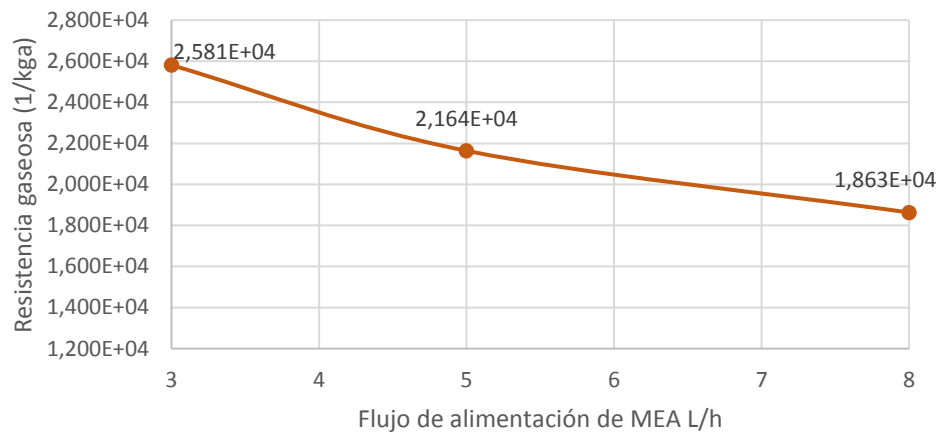
El factor de mejora va disminuyendo desde el domo hasta el fondo de la columna, alcanzando valores muy altos a pesar de tener una convección muy pequeña la reacción se está favoreciendo. Por lo tanto si ponemos en contacto directo, sin movimiento a la MEA con el CO₂ ¿Se obtendría un valor de mejora más alto? La respuesta a la pregunta es no, puesto que el fenómeno que estaría predominando sería la difusión, inhibiendo a la reacción, es decir es importante observar que a pesar de tener una convección muy pequeña la reacción se favorece hasta 12.425.

Al incrementar el flujo de alimentación el factor de mejora disminuye, ya que una vez más el efecto del tiempo de residencia se manifiesta, ya observado desde la gráfica 1. Esta observación se respalda con la gráfica de Van Krevelens y Hoftijzer, al incrementar el gasto el coeficiente individual de transferencia de masa del lado

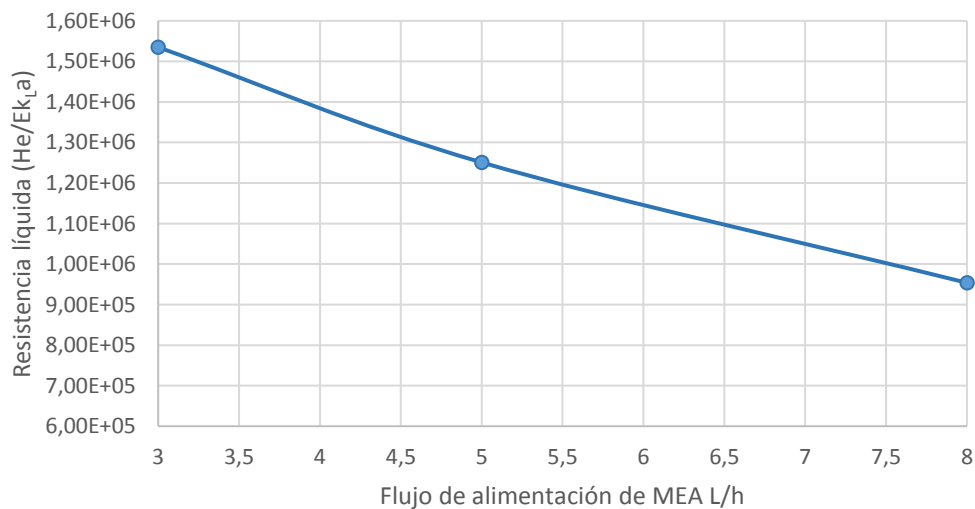
del líquido k_L aumenta y el módulo de Hatta disminuye por lo que se obtienen valores del factor de mejora menores.

Para incrementar el factor de mejora, se tiene que dar mayor tiempo de contacto entre el CO₂ y la MEA, lo cual se logra necesariamente con una torre más alta.

Las siguientes graficas representan el comportamiento de las resistencias que están presentes en la rapidez de transferencia de masa con reacción química, y tiene por objeto ver, cuál de las dos resistencias tiene mayor predominio en la transferencia de masa. Se considera que la resistencia que tiene más influencia sobre la transferencia de masa es aquella que tiene el valor más alto.



Gráfica 3. Representación gráfica del comportamiento de la resistencia gaseosa a diferentes flujos de alimentación.



Gráfica 4. Representación gráfica del comportamiento de la resistencia líquida a diferentes flujos de alimentación.

La resistencia del lado de líquido tiene valores de $\times 10^6$ mayores a los de la resistencia del lado del gas ($\times 10^4$), si se considera que la resistencia que tiene más influencia sobre la transferencia de masa es aquella que tiene el valor más alto, la resistencia del lado del líquido es la que determina el valor de R_A .

Por esta razón el flujo de la corriente líquida fue la única variable que se modificó y no el de la corriente gaseosa, ya que si se cambia el flujo de la corriente gaseosa los resultados no hubieran sido significativos puesto que la resistencia gaseosa no tiene mucha influencia en el valor final de R_A .

BIBLIOGRAFÍA

1. Geankoplis, Christie J., MASS TRANSPORT PHENOMENA. Holt, Rinehart and Winston, Inc.
2. J.R Welty, C. E. Wicks / R. E. Wilson, " FUNDAMENTALS OF MOMENTUM, HEAT AND MASS TRANSFER", John Wiley & Sons, Inc.
3. Hines, Anthony L. / Maddox, Robert N. " MASS TRANSFER: FUNDAMENTALS AND APPLICATIONS, Prentice Hall, 1985.
4. Bird, R. Byron / Stewart Warren E., TRANSPORT PHENOMENA, Second Edition Wiley 1924.
5. Novella, E. Costa, Ingeniería Química, 5. Transferencia de Masa. 1º parte., Alhambra, Madrid 1988
6. P.V. Danckwerst, Gas-Liquid Reactions, McGraw-Hill, New York, 1970.
7. P.V. Danckwerst, G.C., M.B.E., M.A., S.M., C. Eng. And M.M. Sharma, B. Chem. Eng., M, Sc. (Tech), Ph.D., A.R.I.C., The Absorption dioxide into solutions of alkalis and amines. (with some notes on hydrogen sulphide and carbonil sulphide). Review Series No. 2., The Chemical Engineer, October, 1966.
8. Aquil Jamal, Axel Meisen, C Jim Lim. Kinetics of carbón dioxide absorption and desorption in aqueous alkanolamine solutions using a novel hemispherical contactor- I. Experimental apparatus and mathematical modeling. Chemical Engineering Science 61 (2006).
9. Ricardo Lobo Oehmichen, PRINCIPIOS DE TRANSFERENCIA DE MASA. Universidad Autónoma Metropolitana, 1997.
10. Octave Levenspiel, INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS 3/e, Editorial limusa Wiley 2004, Ciudad de México.
11. James R. Welty, Charles E. Wilson, 2/e. FUNDAMENTOS DE TRANSFERENCIA DE MAMENTUM, CALOR Y MASA, Limusa Wiley. Ciudd de México 2000.
12. Norman, W. S. DESTILATION, ABSORTION AND COOLING TOWERS, John Wiley and Sons, 1961.
13. Antonio Valiente B., Mariano Pérez Camacho, Ricardo Pérez Camacho. MASS TRANSFER COEFFICIENTS IN AN ABSORBER REACTOR IN THE UNIT OPERATIONS LABORATORY. Multidisciplinary Research. February 2018.
14. Van Krevelen, D. W., Hoftyzer, P. J., GRAPHICAL DESIGN OF GAS-LÍQUID CONTACTORS, Chemical Engineering Science, January, 1953.
15. Henley, E. J., Seader, J. D., EQUILIBRIUM-STAGE SEPARATION OPERATIONS IN CHEMICAL ENGINEERING, John Wiley and Sons, 1981.

APÉNDICE A

En este apéndice se desarrollarán las ecuaciones para calcular el flux molar en un fenómeno de difusión a través de un medio estancado, partiendo de la ecuación general de transferencia de masa:

$$N_{Az} = -cD_{AB} \frac{dx_A}{dz} + x_A(N_{Az} + N_{Bz}) \quad (1.2.3)$$

Donde

$N_{Bz} = 0$ el termino convectivo del aire vale 0 por que se encuentra estancado.

Por lo tanto:

$$N_{Az} = -cD_{AB} \frac{dx_A}{dz} + x_A(N_{Az}) \quad (1.2.3.1)$$

Separando variables:

$$N_{Az}(1-x_A) = -cD_{AB} \frac{dx_A}{dz}$$

$$N_{Az} = -\frac{cD_{AB}}{(1-x_A)} \frac{dx_A}{dz} \quad (1.2.3.2)$$

Aplicando el balance de materia en estado estacionario sobre el incremento de la columna Δz :

$$SN_{Az}|_z - SN_{Az}|_{z+\Delta z} = 0 \quad (1.2.3.3)$$

Donde S es el área de la sección transversal de la columna.

La Ec. 1.2.3.2 establece que la cantidad de A que entra al plano z es igual a la cantidad de A que sale en el plano $z + \Delta z$. Al dividir entre $S\Delta z$ y tomando como límite cuando $\Delta z \rightarrow 0$, se obtiene:

$$-\frac{dN_{Az}}{dz} = 0 \quad (1.2.3.4)$$

Al sustituir la Ec.1.2.3.2 en la Ec. 1.2.3.4 se obtiene:

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{cD_{AB}}{1-x_A} \frac{dx_A}{dz} \right) = 0 \quad (1.2.3.5)$$

Para comportamiento ideal a presión y temperatura constantes, la concentración debe ser una constante y D_{AB} no depende de la concentración, se tiene:

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{1-x_A} \frac{dx_A}{dz} \right) = 0 \quad (1.2.3.6)$$

Integrando la Ec. 1.2.3.6 se obtiene la constante C_1

$$\frac{dx_A}{(1-x_A)dz} = C_1$$

Integrando nuevamente y obteniendo así una segunda constante C_2

$$-Ln(1-x_A) = C_1 z + C_2$$

Resolviendo la ecuación con las siguientes condiciones a la frontera:

$$\text{en } z=z_1, \quad x_A = x_{A1}$$

$$\text{en } z=z_2, \quad x_A = x_{A2}$$

Una vez obtenida las constantes, finalmente se llega a:

$$\left(\frac{1-x_A}{1-x_{A1}} \right) = \left(\frac{1-x_{A2}}{1-x_{A1}} \right)^{\frac{z-z_1}{z_2-z_1}} \quad (1.2.3.7)$$

Los perfiles para el gas B se obtienen usando $x_B = 1 - x_A$. Los perfiles de concentración se muestran en la imagen 5 donde se observa que la pendiente dx_A / dz no es constante y N_{Az} si lo es. Conociendo los perfiles de concentración se puede obtener valores medios y densidades de flujo de masa en las superficies.

$$\frac{x_{Bmedia}}{x_{B1}} = \frac{\int_{z_1}^{z_2} (x_B / x_{B1}) dz}{\int_{z_1}^{z_2} dz} = \frac{\int_0^1 (x_{B2} / x_{B1})^\zeta d\zeta}{\int_0^1 d\zeta} = \frac{(x_{B2} / x_{B1})^\zeta}{\ln(x_{B2} / x_{B1})} \Big|_0^1$$

Donde $\zeta = (z - z_1) / (z_2 - z_1)$ es una variable de longitud adimensional. Este promedio puede volver a escribirse como:

$$x_{Bmedia} = \frac{x_{B2} - x_{B1}}{\ln(x_{B2} / x_{B1})} \quad (1.2.3.8)$$

La velocidad de transferencia de materia en la interfase liquido- gas, se puede obtener a partir de la siguiente ecuación:

$$N_{Az} \Big|_{z=z_1} = - \frac{cD_{AB}}{1-x_A} \frac{dx_A}{dz} \Big|_{z=z_1} = + \frac{cD_{AB}}{x_{B1}} \frac{dx_B}{dz} \Big|_{z=z_1} = \frac{cD_{AB}}{z_2 - z_1} \ln \left(\frac{x_{B2}}{x_{B1}} \right) \quad (1.2.5)$$

Al combinar las Ec. 1.2.5 y 1.2.3.8 se obtiene finalmente:

$$N_{Az} = \frac{cD_{AB}}{(z_2 - z_1)(x_B)_m} \ln(x_{A1} - x_{A2})$$

Esta expresión proporciona la velocidad de evaporación en términos de la fuerza impulsora característica $x_{A1} - x_{A2}$. Estas ecuaciones que representan el flux molar del componente A son equivalentes.

APENDICE B

En este apéndice se tratarán las ecuaciones para llegar al flux de transferencia de masa de la teoría de la doble película.

Las condiciones de interfase del lado del líquido y del gas son difíciles de evaluar, para ello es necesario eliminar P_{Ai} y C_{Ai} de las ecuaciones anteriores, para esto se considera la existencia de un estado de equilibrio ya mencionado y de esta manera establecer la relación entre ambas fases.

$$P_{Ai} = HC_{Ai} \quad (2.1.1.1)$$

Si se sustituye la Ec. (2.1.1.1) en la ecuación del flux de transferencia de masa del lado del gas y se obtiene

$$N_{AGi} = k_g (P_{Ab} - HC_{Ai}) \quad (2.1.1.2)$$

Se considera que la interfase no es un lugar capaz de almacenar materia dado que no tiene espesor, por lo que necesariamente el flux de gas que llega a la interfase es el mismo que entra a la fase líquida, es decir:

$$N_A = N_{AGi} = N_{AiL} \quad (2.1.1.3)$$

Es decir:

$$N_A = k_g (P_{Ab} - HC_{ai}) = k_l (C_{Ai} - C_{Ab}) \quad (2.1.1.4)$$

Despejando C_{Ai}

$$k_G P_{AB} - k_G H C_{Ai} = k_L C_{Ai} - k_L C_A^*$$

$$k_G P_{AB} + k_L C_A^* = k_L C_{Ai} + k_G H C_{Ai}$$

$$k_G P_{AB} + k_L C_A^* = C_{Ai} (k_L + k_G H)$$

$$C_{Ai} = \frac{P_{Ab} k_g + k_l C_{Ab}}{k_g H + k_l} \quad (2.1.1.5)$$

La Ec. 2.1.1.5 se puede sustituir en 2.1.1.4, simplificando términos se tiene:

$$N_A = k_l \left[\left(\frac{P_{Ab} k_g + k_l C_{Ab}}{k_g H + k_l} \right) - C_{Ab} \right] \quad (2.1.1.6)$$

$$N_A = \frac{k_G P_{AB} k_L + k_L k_L C_A^* - k_L C_A^*}{k_L + k_G H} \left(\frac{1}{\frac{k_L}{k_L}} \right)$$

$$N_A = \frac{k_G P_{AB} + k_L C_A^* - k_L C_A^*}{1 + \frac{k_G}{k_L} H}$$

$$N_A = \frac{k_G P_{AB} + k_L C_A^* - k_L C_A^* \left(1 + \frac{k_G}{k_L} H \right)}{1 + \frac{k_G}{k_L} H}$$

$$N_A = \frac{k_G P_{AB} + k_L C_A^* - k_L C_A^* + \frac{k_L C_A^* k_G H}{k_L}}{1 + \frac{k_G}{k_L} H} \left(\frac{1}{\frac{k_G}{k_G}} \right)$$

$$N_{AZ} = \frac{P_{AB} + C_A^* H}{\frac{1}{k_G} + \frac{H}{k_L}}$$

Finalmente obtenemos la ecuación para el Flux total de transferencia de masa

$$N_{AZ} = \frac{1}{\frac{1}{k_G} + \frac{H}{k_L}} (P_{AB} - H C_{AB}) \quad (2.1.3)$$

Se observa que la ecuación (6) está relacionada con la constante de Henry por lo que; si el gas es muy soluble en el líquido absorbente la constante de Henry es muy

pequeña lo que ocasiona que la resistencia de la fase líquida sea muy despreciable, es decir:

$$K_G \approx k_g$$

Para obtener el coeficiente de transferencia de masa global del lado de líquido se sustituye $P_{Ai} = HC_{Ai}$ en la Ec.2.1.1.4 e igualamos el flux del lado del gas con el flux del lado del líquido obtenemos.

$$k_G(P_{AB} - P_{Ai}) = k_L \left(\frac{P_{Ai}}{H} - C_A^* \right) \quad (2.1.3.1)$$

$$k_G P_{AB} - k_G P_{Ai} = k_L \frac{P_{Ai}}{H} - k_L C_A^*$$

$$k_L \frac{P_{Ai}}{H} + k_G P_{Ai} = k_G P_{AB} + k_L C_A^*$$

$$P_{Ai} = \frac{k_G P_{AB} + k_L C_A^*}{\frac{k_L}{H} + k_G}$$

Sustituyendo en $k_G(P_{AB} - P_{Ai}) = k_L(C_{Ai} - C_A^*)$

$$N_A = k_G(P_{AB} - P_{Ai})$$

$$N_A = k_G \left(P_{AB} - \frac{k_G P_{AB} + k_L C_A^*}{\frac{k_L}{H} + k_G} \right)$$

$$N_A = k_G P_{AB} - \frac{k_G k_G P_{AB} + k_L k_G C_A^*}{\frac{k_L}{H} + k_G}$$

$$N_A = \frac{\left(\frac{k_G P_{AB} k_L}{H} + k_G k_G P_{AB} \right) - k_G k_G P_{AB} + k_L k_G C_A^*}{\frac{k_L}{H} + k_G}$$

$$N_A = \frac{\frac{k_G P_{AB} k_L}{H} - k_L k_G C_A^*}{\frac{k_L}{H} + k_G} \frac{H}{k_L}$$

$$N_A = \frac{\frac{k_G P_{AB} k_L}{H} - k_L k_G C_A^*}{1 + \frac{k_G H}{k_L}} * \frac{1}{\frac{k_G H}{k_L}}$$

$$N_A = \frac{\frac{P_{AB}}{H} - C_A^*}{\frac{1}{k_L} + \frac{1}{k_G H}}$$

$$N_A = \frac{1}{\frac{1}{k_L} + \frac{1}{k_G H}} (C_A^* - C_{AB})$$

Donde el coeficiente de transferencia de masa global

$$K_L = \frac{1}{\frac{1}{k_l} + \frac{1}{H k_g}} \tag{2.1.3.2}$$

Si la constante de Henry H es muy alta, el gas es poco soluble en el líquido, por lo tanto k_L es pequeño por lo que la fase líquida tiene mayor resistencia y es la que predomina el proceso.

$$K_L \approx k_l$$

APÉNDICE C

Para llegar al modelo de la renovación de la superficie propuesto por Danckwerts, se mostrará a detalle en este apéndice.

$$\overline{N_A} = \int_0^\infty \phi(t) N_A(t) \Big|_{z=0} dt$$

Donde

$$N_A(t) \Big|_{z=0} = -D_{AB} \left(\frac{\partial C_A}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = (C_{Ai} - C_A^*) \left(\frac{D_{AB}}{\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.2)$$

$$\int_0^\infty S e^{-st} (C_{Ai} - C_A^*) \left(\frac{D_{AB}}{\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} dt = \sqrt{D_{AB} S} (C_{Ai} - C_A^*)$$

$$\overline{N_A} = (C_{Ai} - C_A^*) \left(\frac{D_{AB}}{\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} S \int_0^\infty \frac{e^{-st}}{t^{\frac{1}{2}}} dt$$

La solución de la integración es

$$S \int_0^\infty \frac{e^{-st}}{t^{\frac{1}{2}}} dt$$

Haciendo un cambio de variable

$$t^{\frac{1}{2}} = \beta$$

$$t = \beta^2$$

$$dt = 2\beta d\beta$$

$$S \int_0^\infty \beta^{-1} e^{-s\beta^2} 2\beta d\beta = 2S \int_0^\infty e^{-s\beta^2} d\beta = 2S \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{S}} \right) = \sqrt{\pi S}$$

Por lo tanto

$$\overline{N_A} = (C_{Ai} - C_A^*) \left(\frac{D_{AB}}{\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\pi S} = \sqrt{D_{AB} S} (C_{Ai} - C_A^*) \quad (2.3)$$

Donde

$$\bar{k}_c = \sqrt{D_{AB}S}$$

APÉNDICE D

En este apéndice se muestran las ecuaciones para llegar a la ecuación del flux de transferencia de masa que considera las tres resistencias.

El balance de materia a través de la interfase en términos de los coeficientes de transferencia de masa está dado por:

$$R_A a = k_G a (P_{AB} - P_{Ai}) = E k_L a (C_{Ai} - C_{Ab}) \quad (2.4)$$

Donde

R_{AA} = Rapidez de transferencia de masa en presencia de una reacción química

E = Factor de Mejora

En esta ecuación que corresponde a aquella condición dada por la Ec.2.4.1 del caso sin reacción química ahora se ha incluido el coeficiente E llamado *Factor de mejora* que tiene la misión de indicar en cuanto se ha mejorado la absorción de la especie A por efecto de la reacción química.

$$N_A = k_G (P_{AB} - HC_{Ai}) = k_L (C_{Ai} - C_{AB}) \quad (2.4.1)$$

También en esta parte se ha cambiado la expresión del flux Volumétrico de transferencia de masa N_{AA} por R_{AA} con la única intención de describir un flux con la presencia de una reacción química.

Si se considera que en la interfase se cumple la ley de Henry

$$P_{Ai} = HC_{Ai} \quad (2.4.2)$$

La Ec. 2.4 se podrá escribir como:

$$R_A a = k_G a (P_{AB} - HC_{Ai}) = E k_L a (C_{Ai} - C_{AB}) \quad (2.4.3)$$

La concentración en la interfase resulta difícil de estimar por lo que resulta deseable escribir la Ec. 2.4.3 en términos parámetros medibles, despejando C_{Ai} se tiene:

$$C_{Ai} = \frac{k_G a P + E k_L a C_{AB}}{E k_L a + k_G H} \quad (2.4.4)$$

Sustituyendo C_{Ai} en el lado derecho de la Ec. 2.4.3 se tiene:

$$R_A a = E k_L a K_G a \left[\frac{P_A - C_{AB} H}{E k_L a + k_G a H} \right] \quad (2.4.5)$$

La cual puede arreglarse para dar como:

$$R_A a = \frac{P_A - C_{AB} H}{\frac{E k_L a}{E k_L a K_G a} + \frac{k_G a H}{E k_L a K_G a}} \quad (2.4.6)$$

Multiplicando por 1/H el numerador tanto como el denominador se llega a:

$$R_A a = \frac{\frac{P_{AB} - C_{AB}}{H}}{\frac{1}{K_G a H} + \frac{1}{E k_L a}} = \frac{1}{\frac{1}{K_G a} + \frac{H}{E k_L a}} (P_{AB} - H C_{AB}) \quad (2.4.7)$$

La Ec.2.4.7 estima el flux del componente A considerando la resistencia tanto de la fase gas como de la fase líquida, sin embargo, se ha observado que para reacciones muy lentas el componente A debe difundirse a lo largo de toda la resistencia líquida aún sin llevarse a cabo la reacción.

$$R_A a = \frac{1}{\underbrace{\frac{1}{K_G a}}_{\text{Re resistencia de la fase gas}} + \underbrace{\frac{H}{E k_L a}}_{\text{Re resistencia de la fase líquida}} + \underbrace{\frac{H}{k C_B f}}_{\text{Re resistencia del líquido}}} (P_{AB} - H C_{AB}) \quad (2.4.8)$$

Si se diera el caso de que toda la especie A se consume dentro de la zona de la fase líquida la Ec. 2.4.8 se verá reducida a:

$$R_A a = \frac{1}{\underbrace{\frac{1}{K_G a}}_{\text{Re resistencia de la fase gas}} + \underbrace{\frac{H}{E k_L a}}_{\text{Re resistencia de la fase líquida}} + \underbrace{\frac{H}{k C_B f}}_{\text{Re resistencia del líquido}}} (P_{AB}) \quad (2.5)$$

APÉNDICE E

Para llegar a la ecuación del Factor de Mejora se realizaron las siguientes ecuaciones:

Si se asume que la interfase satisface la Ley de Henry

$$C_A = HP_A$$

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + V_x \frac{\partial C_A}{\partial x} + V_y \frac{\partial C_A}{\partial y} + V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right) + R_A \quad (2.6)$$

La E. 2.6 se reduce a

$$D_{AB} \frac{d^2 C_A}{dz^2} + R_A = 0 \quad (2.6.1)$$

$$R_A = -k_0 C_A^n \quad n=1 \quad (2.6.2)$$

Sustituyendo la ecuación (13-2) en (13-1)

$$D_{AB} \frac{d^2 C_A}{dz^2} - k_0 C_A = 0 \quad (2.6.3)$$

Condiciones a la frontera

$$z = 0 \quad P_A = P_A(0)$$

$$z = L \quad P_A = P_A(L) = 0$$

Ambas condiciones se dan justo en la interfase

$$z = 0 \quad C_A = HP_{A0} = C_{A0}$$

$$z = L \quad C_A = C_A(L) = 0$$

Si se define $\zeta = \frac{z}{L}$

$$\frac{d^2 C_A}{dz^2} = \frac{d}{dz} \left(\frac{dC_A}{dz} \right) = \frac{d\zeta}{dz} \frac{d}{d\zeta} \left(\frac{d\zeta}{dz} \frac{dC_A}{d\zeta} \right)$$

Pero

$$\frac{d\zeta}{dz} = \frac{1}{L}$$

Por lo tanto

$$\frac{d^2 C_A}{dz^2} = \frac{1}{L} \frac{d}{d\zeta} \left(\frac{1}{L} \frac{dC_A}{d\zeta} \right) = \frac{1}{L^2} \left(\frac{d^2 \zeta}{d\zeta^2} \right)$$

$$\frac{D_{AB}}{L^2} \frac{d^2 C_A}{d\zeta^2} - k_o C_A = 0$$

Multiplicando todo por $\frac{L^2}{D_{AB}}$

$$\frac{d^2 C_A}{d\zeta^2} - \frac{k_o L^2}{D_{AB}} C_A = 0 \quad (2.6.3-1)$$

Definiendo el módulo de Thiele como

$$b = \left(\frac{KL^2}{D_{AB}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{No. de Hatta}$$

La Ec. 2.6.3-1 se puede escribir como:

$$\frac{d^2 C_A}{d\zeta^2} - b^2 C_A = 0 \quad (2.6.3-2)$$

Estableciendo las siguientes condiciones a la frontera:

$$\zeta = 0 \quad C_A = C_{A0}$$

$$\zeta = 1 \quad C_A = 0$$

Se propone una solución de tipo:

$$C_A = ae^{\alpha\zeta}$$

Donde α y a son constantes

Primera derivada:

$$\frac{dC_A}{d\zeta} = \frac{d}{d\zeta} [ae^{\alpha\zeta}] = ae^{\alpha\zeta} \frac{d}{d\zeta} (\alpha\zeta) = a\alpha e^{\alpha\zeta}$$

Segunda derivada:

$$\frac{d^2 C_A}{d\zeta^2} = \frac{d}{d\zeta} [ae^{\alpha\zeta}] = ae^{\alpha\zeta} \frac{d}{d\zeta} (\alpha\zeta) = a\alpha e^{\alpha\zeta} \frac{d(\alpha\zeta)}{d\zeta} = a\alpha^2 e^{\alpha\zeta}$$

Sustituyendo en la Ec. 2.6.3-2

$$a\alpha^2 e^{\alpha\zeta} - b^2 a e^{\alpha\zeta} = 0$$

Dividiendo entre $a e^{\alpha\zeta}$

$$\alpha^2 - b^2 = 0 \quad \therefore \alpha^2 = b^2$$

Hay dos soluciones $\alpha = \pm\sqrt{b^2}$; $\alpha = \pm b$

$$C_A = a_1 e^{b\zeta} \quad C_A = a_2 e^{-b\zeta}$$

Siguiendo el principio de superposición

$$C_A = a_1 e^{b\zeta} + a_2 e^{-b\zeta}$$

a_1 y a_2 se evalúan con condiciones a la frontera

$$C_{A0} = a_1 e^{b(0)} + a_2 e^{-b(0)}$$

$$C_{A0} = a_1 + a_2 \rightarrow a_1 = C_{A0} - a_2$$

$$0 = a_1 e^{b(1)} + a_2 e^{-b(1)}$$

$$0 = (C_{A0} - a_2) e^b + a_2 e^{-b}; \text{ resolviendo para } a_2$$

$$C_A(0) e^b - a_2 e^b + a_2 e^{-b} = 0$$

$$-C_A(0) e^b + a_2 e^b - a_2 e^{-b} = 0$$

$$a_2 e^b - a_2 e^{-b} = C_{A0} e^b$$

$$a_2 (e^b - e^{-b}) = C_{A0} e^b$$

$$a_2 = \frac{C_{A0} e^b}{(e^b - e^{-b})}$$

$$a_1 = C_{A0} - \left[\frac{C_{A0} e^b}{(e^b - e^{-b})} \right] = C_{A0} \left[1 - \frac{e^b}{e^b - e^{-b}} \right] = 1 - \frac{e^b}{e^b - e^{-b}} = \frac{e^b - e^{-b} - e^b}{e^b - e^{-b}} = \frac{e^{-b}}{e^b - e^{-b}}$$

$$a_1 = -C_{A0} \frac{e^{-b}}{e^b - e^{-b}}$$

Sustituyendo a_1 y a_2

$$C_A = \left[-C_{A0} \frac{e^{-b}}{e^b - e^{-b}} \right] e^{b\zeta} + \left[\frac{C_{A0} e^b}{e^b - e^{-b}} \right] e^{-b\zeta}$$

Dividiendo todo entre C_{A0}

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{-e^b e^{b\zeta} + e^b e^{-b\zeta}}{e^b - e^{-b}}$$

$$\text{senhb} = \frac{e^b - e^{-b}}{2}$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{e^{(1-\zeta)} - e^{-b(1-\zeta)}}{e^b - e^{-b}} = \frac{\text{senhb}(1-\zeta)}{\text{senhb}}$$

El flux molar de A se puede calcular como:

$$N_{Az}|_{z=0} = -cD_{AB} \left. \frac{dC_A}{dz} \right|_{z=0}$$

Sustituyendo C_A

$$C_A = C_{A0} \frac{\text{senhb}(1-\zeta)}{\text{senhb}} = C_{A0} \frac{\text{Senhb}\left(1 - \frac{z}{L}\right)}{\text{senhb}}$$

$$N_{Az}|_{z=0} = \frac{d}{dz} \left[C_{A0} \frac{\text{Senhb}\left(1 - \frac{z}{L}\right)}{\text{senhb}} \right]_{z=0}$$

$$N_{Az}|_{z=0} = \frac{C_{A0}}{\text{Senhb}} \frac{d}{dz} \left[\text{Senhb}\left(1 - \frac{z}{L}\right) \right]_{z=0}$$

Resolviendo

$$\frac{d\text{Senh}U}{dx} = \text{Cosh}U \frac{dU}{dz}$$

$$\text{si; } u = b\left(1 - \frac{z}{L}\right)$$

$$\left. \frac{dC_A}{dz} \right|_{z=0} = \left[\frac{C_{A0}}{\text{Senhb}} \text{Cosh}b\left(1 - \frac{z}{L}\right) \frac{d}{dz} \left[b\left(1 - \frac{z}{L}\right) \right] \right]_{z=0}$$

$$\left. \frac{dC_A}{dz} \right|_{z=0} = \left[\frac{C_{A0}}{\text{Senhb}} \text{Coshb} \left(1 - \frac{z}{L} \right) b \frac{d}{dz} \left(1 - \frac{z}{L} \right) \right]_{z=0}$$

$$\left. \frac{dC_A}{dz} \right|_{z=0} = \frac{C_{A0}}{L} \left[\frac{\text{Coshb} \left(1 - \frac{z}{L} \right)}{\text{senhb}} \right]_{z=0}$$

Obtenemos así el factor de mejora.

$$N_{Az} = \frac{C_{A0} D_{AB}}{L} \left(\frac{b}{\tanh b} \right)$$

APÉNDICE F

En este apéndice se deducirán las ecuaciones para los casos A y D propuestos por Levenspiel [10].

CASO A. Reacción instantánea con respecto a la transferencia de masa con C_A alto

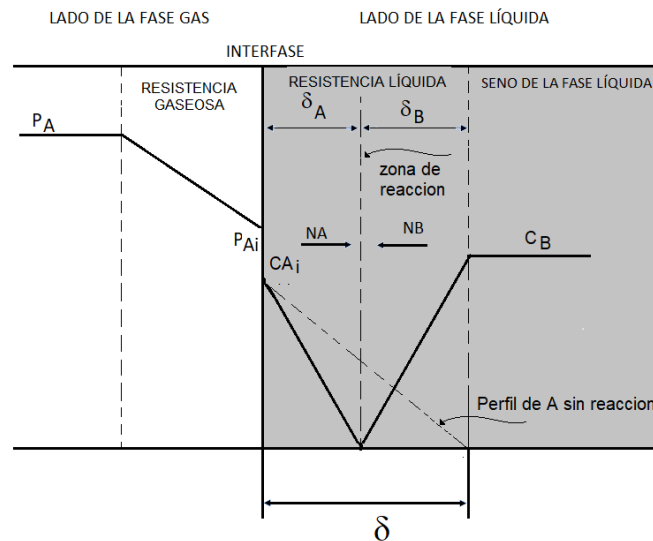


Figura 2.1.5 Caso A. Reacción instantánea con C_A alto, con resistencias gas-líquido presentes.

Balace a través de las resistencias presentes durante la difusión con reacción química instantánea a régimen permanente.

$$NA_Z = -r_A'' = -\frac{r_B''}{b} = k_{Ag} (P_A - P_{Ai}) = k_{Al} (C_{Ai} - 0) \frac{\delta}{\delta_A} = \frac{k_{Bl}}{b} (C_B - 0) \frac{\delta}{\delta_B} \quad (3)$$

En base a la teoría de la película cada uno de los términos de la Ec.3 puede escribirse como:

Flux del componente A en la resistencia gaseosa

$$N_A = -r_A'' = k_{Ag} (P_A - P_{Ai}) \quad (3.1.1-1)$$

Flux de A en la resistencia líquida

$$N_A = K_{Al} (C_{Ai} - 0) \frac{\delta}{\delta_A} = \frac{D_{Al}}{\delta} (C_{Ai} - 0) \frac{\delta}{\delta_A} = \frac{D_{Al}}{\delta_A} (C_{Ai} - 0) \quad (3.1.1-2)$$

Flux de B en la resistencia gaseosa

$$N_A = -N_B = \frac{K_{Bl}}{b} (C_B - 0) \frac{\delta}{\delta_B} = \frac{D_{Bl}}{\delta} \left(\frac{C_{Bl}}{b} - 0 \right) \frac{\delta}{\delta_B} = \frac{D_{Bl}}{\delta_B} \left(\frac{C_{Bl}}{b} - 0 \right) \quad (3.1.1-3)$$

Por lo que se puede plantear la siguiente relación

$$\frac{K_{Al}}{K_{Bl}} = \frac{\frac{D_{Al}}{\delta}}{\frac{D_{Bl}}{\delta}} = \frac{D_{Al}}{D_{Bl}} \quad (3.1.1-4)$$

Se puede establecer que en la interfase gas-líquido se cumple con la ley de Henry

$$P_{Ai} = H C_{Ai} \quad (3.1.1-5)$$

De Ec.3.1.1-2 se puede obtener la distancia de la difusión-reacción que ocupa el componente A dentro de la resistencia líquida

$$\delta_A = \frac{D_{Al}}{N_A} C_{Ai} = \frac{K_{Al} C_{Ai} \delta}{N_A} \quad (3.1.1-6)$$

De la misma forma la distancia que ocupa el componente B dentro de la misma resistencia líquida es:

$$\delta_B = \frac{D_{Bl}}{N_A} \left(\frac{C_B}{b} \right) = \frac{K_{Bl} \left(\frac{C_B}{b} \right) \delta}{N_A} \quad (3.1.1-7)$$

La suma de ambas distancias necesariamente corresponde al espesor total de la resistencia líquida

$$\delta = \frac{D_{Al}}{N_A} C_{Ai} + \frac{D_{Bl}}{N_A} \frac{C_B}{b} \quad (3.1.1-8)$$

El Flux del componente A estará dado por:

$$N_A = \frac{D_{Al} C_{Ai}}{\delta} + \frac{D_{Bl} \frac{C_B}{b}}{\delta} \quad (3.1.1-9)$$

Arreglando la Ec.3.1.1-9 a fin de expresarla en términos de un coeficiente del lado del líquido

$$N_A = \frac{D_{Al}}{\delta} \left(C_{Ai} + \frac{D_{Bl}}{D_{Al}} \frac{C_B}{b} \right) = K_{Al} \left(C_{Ai} + \frac{D_{Bl}}{D_{Al}} \frac{C_B}{b} \right) \quad (3.1.1-10)$$

La Ec.2 permite obtener una expresión de la composición C_{Ai} que hasta ahora no permite la aplicación de la Ec.3.1.1-10.

Aplicando la Ley de Henry en la Ec. 3.1.1-1 se tiene:

$$N_A = K_{Ag} (P_A - P_{Ai}) = K_{Ag} (P_A - H C_{Ai}) \quad (3.1.1-11)$$

Resolviendo para C_{Ai} se tiene:

$$C_{Ai} = \frac{P_A}{H} - \frac{N_A}{K_{Ag} H} \quad (3.1.1-12)$$

Sustituyendo Ec. 3.1.1-12 en Ec. 3.1.1-10, se tiene:

$$N_A = K_{Al} \left(C_{Ai} + \frac{D_{Bl}}{D_{Al}} \frac{C_B}{b} \right) = K_{Al} \left(\frac{P_A}{H} - \frac{N_A}{K_{Ag} H} + \frac{D_{Bl}}{D_{Al}} \frac{C_B}{b} \right) \quad (3.1.1-13)$$

Desarrollando el término entre paréntesis

$$N_A = \frac{K_{Al} P_A}{H} - \frac{K_{Al} N_A}{K_{Ag} H} + \frac{K_{Al} D_{Bl}}{D_{Al}} \frac{C_B}{b} \quad (3.1.1-14)$$

Finalmente arreglando Ec.15 se llega a:

$$N_A = \frac{\left(\frac{P_A}{H} \right) + \frac{D_{Bl}}{D_{Al}} \frac{C_B}{b}}{\frac{1}{K_{Al}} + \frac{1}{K_{Ag} H}} \quad (3.1.2)$$

La Ec.16 ahora permite calcular el flux del componente A en presencia de una reacción química de pseudo primer orden en términos de parámetros medibles

CASO D: Reacción rápida con C_B alto, por tanto una reacción de pseudo primer orden

La Ecuación de transferencia de masa desde la fase gas hasta la fase líquida pasando por la interfase gas-líquido está dado por:

$$R_A = K_g a (P_A - P_{A_i}) = E k_L a (C_{A_i} - C_A) \quad (3.1.7)$$

En donde se ha considerado el factor de mejora E, el cual de no haber reacción tomará un valor de 1.

Como las condiciones de interfase no se pueden estimar directamente, es necesario considerar la ecuación de Henry dada por:

$$P_{A_i} = H C_{A_i}$$

Por lo que la Ec.3.1.7 puede escribirse como:

$$R_A = K_g a (P_A - H C_{A_i}) = E k_L a (C_{A_i} - C_A) \quad (3.1.8)$$

La cual puede arreglarse para dar

$$k_g a P + E k_L a C_A = C_{A_i} (E k_L a + k_g a H) \quad (3.1.9)$$

Por lo que la concentración en la interfase se puede calcular como:

$$C_{A_i} = \frac{k_g a P + E k_L a C_A}{E k_L a + k_g a H} \quad (3.1.9-1)$$

La expresión de la rapidez de transferencia de masa en presencia de una reacción química se puede obtener sustituyendo la Ec.5 en la Ec.2 para llegar finalmente a:

$$R_A a = E k_L a k_g a \left[\frac{P - C_A H}{E k_L a + k_g a H} \right] \quad (3.1.9-2)$$

También:

$$R_A a = \frac{P - C_A H}{\frac{1}{k_g a} + \frac{H}{E k_L a}} \quad (3.1.9-3)$$

Como lo muestra la figura de este anexo, la reacción se lleva a cabo en la superficie y dada la característica de ser rápida, la concentración del componente A tiene la posibilidad de agotarse aún antes de terminar el espesor de la resistencia líquida, por lo que puede asumirse en la Ec.7 que $C_A=0$. Por otro lado si el factor de mejora $E \gg 1$ siendo $E = \sqrt{M} = \frac{\sqrt{k C_B D_{AL}}}{k_L}$, la rapidez de transferencia de masa resulta ser

independiente del coeficiente de película del lado del líquido, se dice entonces que se tiene un régimen de pseudo primer orden por lo que la Ec. 3.1.9-3 se transforma en:

$$R_A a = \frac{1}{\frac{1}{k_g a} + \frac{H}{a \sqrt{D_{AL} k C_B}}} P \quad (3.2)$$