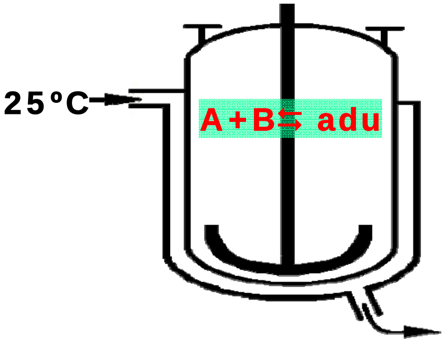
A.Aznar y J.C.Cabanelas

P.3.6.- La reacción de Diels-Alder del ciclopentadieno (A) con la benzoquinona (B) para dar el aducto a 25ºC, posee una k de 9.92 .10^{-3} m^3/kmol s. Suponiendo que el cambio de volumen durante la reacción es despreciable, que el grado de conversión deseado es del 95% y que las concentraciones iniciales de A y B son de 0,1 y 0,08 kmol/m^3 respectivamente, calcular el volumen del reactor necesario para obtener la producción de aducto de 10 m^3/día, utilizando el reactor discontinuo isotermo de mezcla perfecta y que el ciclo de carga y descarga utiliza 1,80 horas de tiempo muerto



$k = 9{,}92\cdot10^{-3}\ m^3\cdot kmol^{-1}\cdot s^{-1}$
$[A]_o = 0{,}1\ kmol\cdot m^{-3}$
$[B]_o = 0{,}08\ kmol\cdot m^{-3}$
$X_B = 0{,}95$
$t_{parada} = 1{,}8\ h$
Producción 10 $m^3\cdot día^{-1}$

E = S + C

Base de cálculo: 1 ciclo

Estequeometría 1:1 $[A]_o > [B]_o \Rightarrow$ **Reactivo limitante B**

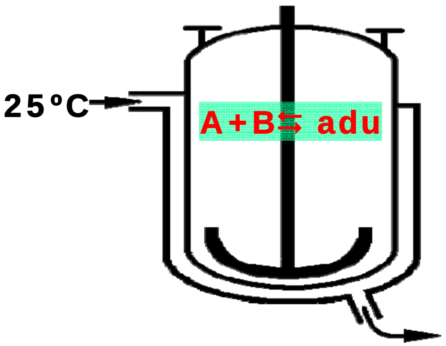
$$\begin{cases} n_B = n_{B_o}(1-X_B) \quad \Rightarrow \quad [B] = [B]_o(1-X_B) \\ [A] = [A]_o - ([B]_o - [B]) = [A]_o - [B]_o X_B \end{cases}$$

$$|kmol\cdot m^{-3}\cdot s^{-1}| = |m^3\cdot kmol^{-1}\cdot s^{-1}|\cdot|kmol\cdot m^{-3}|^n \quad \Rightarrow \quad \text{OR} <> n = 2$$

$$\nu = -\frac{d[B]}{dt} = -\frac{1}{V}\frac{dn_B}{dt} = k\cdot[A]\cdot[B] \begin{cases} \nu = -\frac{1}{V}\frac{dn_B}{dt} = -\frac{1}{V}\frac{d\left(n_{B_o}(1-X_B)\right)}{dt} = \frac{n_{B_o}}{V}\frac{dX_B}{dt} = [B]_o\frac{dX_B}{dt} \\ \nu = k\cdot[A]\cdot[B] = k\cdot([A]_o - [B]_o X_B)\cdot[B]_o(1-X_B) = k\cdot[A]_o[B]_o(1-X_B)\left(1-\frac{[B]_o X_B}{[A]_o}\right) \end{cases}$$

A.Aznar y J.C.Cabanelas

P.3.6.- (cont.)



$k = 9{,}92\cdot10^{-3}\ m^3\cdot kmol^{-1}\cdot s^{-1}$
$[A]_o = 0{,}1\ kmol\cdot m^{-3}$
$[B]_o = 0{,}08\ kmol\cdot m^{-3}$
$X_B = 0{,}95$
$t_{parada} = 1{,}8\ h$
Producción $10\ m^3\cdot día^{-1}$

$$\nu = [B]_o\frac{dX_B}{dt} = k\cdot[A]_o[B]_o(1-X_B)\left(1-\frac{[B]_o X_B}{[A]_o}\right) \Rightarrow \frac{dX_B}{k\cdot[A]_o(1-X_B)\left(1-\frac{[B]_o X_B}{[A]_o}\right)} = dt$$

$$\frac{1}{k\cdot[A]_o}\int_0^{X_B}\frac{dX_B}{(1-X_B)\left(1-\frac{[B]_o}{[A]_o}X_B\right)} = \int_0^{t_r} dt \Rightarrow t_r = \frac{1}{k\cdot([A]_o-[B]_o)}\cdot\log\frac{([A]_o-[B]_o\cdot X_B)}{([A]_o(1-X_B))} \Rightarrow t_r = 3434\ s$$

$$\int\frac{dx}{(a+bx)(c+dx)} = \frac{1}{(a\cdot d+b\cdot c)}\log\frac{(c+dx)}{(a+bx)}$$

$$a=1;\ b=-1;\ c=1;\ d=-\frac{[B]_o}{[A]_o}$$

$$t_r = 0{,}95\ h$$

$t_{total} = t_r + t_{muerto} = 0{,}95 + 1{,}8\ h = 2{,}75\ h\ ciclo^{-1}$

nº ciclos $dia^{-1} = 24\ h\ dia^{-1}\ /\ 2{,}75\ h\ ciclo^{-1} = 8{,}7 \approx 8$ ciclos dia^{-1}

$V_R = 10\ m^3 dia^{-1} / 8\ ciclos\ dia^{-1} = 1{,}25\ m^3$