

Producción de Acido Acetilsalicílico

INFORMACION GENERAL

PRODUCCIÓN MUNDIAL

Según datos extraídos de la propia web de la multinacional Química Farmacéutica Bayer, S.A, la aspirina (ácido acetilsalicílico) es el fármaco mas consumido en el mundo, **se producen anualmente unas 50.000 toneladas y se consumen 216 millones de unidades** de aspirina en un solo día en todo el planeta. Todo un record mundial de lo más sano, gracias a la invención del medicamento por parte de Felix Hoffman, el 10 de agosto de 1897.

PRODUCCIÓN NACIONAL

No se encuentran datos específicos de la producción colombiana, sin embargo se sabe que la multinacional Bayer tiene algunas empresas en Cali, Barranquilla y Bogota.

UTILIZACIÓN O APLICABILIDAD DEL PRODUCTO

La popularidad del ácido acetilsalicílico (aspirina) se incrementa año tras año aun con la aparición en el mercado de nuevos medicamentos mejores y a precios mas accesibles, su uso ha aumentado debido a las nuevas aplicaciones y propiedades que se le han encontrado. En principio, se usó como antipirético, analgésico y antiinflamatorio, por lo que es muy utilizado en el tratamiento de fiebre reumática, reumatismo, gota y artritis reumatoide. Con el tiempo, estos usos se han ampliado.

En 1950, Lawrence Craven fue el primero en utilizar la aspirina para evitar la formación de coágulos en enfermedades como trombosis cerebral e infartos al miocardio, debido a que ayuda a prevenir la acumulación de plaquetas.

Por muchos años permaneció en el misterio el modo de acción de la aspirina. John R. Vane, ganador del premio nobel en 1982 , propuso en 1971 una hipótesis para explicar su actividad antiinflamatoria. Considera que esta bloquea la síntesis de algunas prostaglandinas (hormonas celulares involucradas en el dolor e inflamación de órganos y tejidos y en la aglutinación de las plaquetas), por lo que

reduce el riesgo de formación de coágulos. Comprueba así lo establecido por Craven.

Esta propiedad también la hace útil en el tratamiento de otras enfermedades, como la hipertensión gestacional y la migraña . También se ha observado que la aspirina disminuye en un 40% la mortalidad debida a cáncer en el estomago y que favorece la oxigenación de la sangre en el cerebro.

A pesar de sus virtudes, hay que recordar que nunca debe recurrirse a la automedicación . La aspirina como todos los medicamentos, presenta efectos indeseables, que pueden ser peligrosos en ciertos individuos, como los hemofílicos u otros con ciertas enfermedades gastrointestinales.

METODOS DE SÍNTESIS Y CUAL ES EL MAS USADO

Aunque actualmente se trata de un medicamento sintético, en un principio fue semisintético , ya que se obtuvo a partir de la "salicina", intermediario de origen vegetal, extraído de la corteza de varias especies de sauces.

Hipócrates, el célebre médico del siglo V a.C, recomienda a sus pacientes la corteza de sauce como remedio para aliviar el dolor. Desde épocas remotas, dicha corteza y las hojas de sauce se han utilizado para calmar el dolor de neuralgias y reumatismo.

Franceses y alemanes compitieron para encontrar el principio activo de la corteza de sauce. En 1828, Johann A.Buchner, químico farmacéutico del Instituto Farmacológico de Munich, aisló una pequeña cantidad de un glucósido: "la salicina".

En 1833, E. Merck obtuvo la salicina pura.

En 1838, Raffaele Piria (de Pisa, Italia), aisló otro compuesto que denominó ácido salicílico. Anteriormente, el químico sueco Karl Jacob extrajo de una planta (Spiraea Ulnaria), un aceite soluble en éter del cual cristalizó un ácido que denominó "Spirsaure", el cual resultó ser igual al ácido salicílico.

En 1843, A. Cahours, farmacólogo de Gales, demostró que el aceite de Wintergreen , utilizado para aliviar dolores, contenía el éster metílico del ácido salicílico. Este aceite se extrae de una planta (Gualteria procubens) de la familia de las Ericáceas.

En 1853, Charles Gerhardt , químico francés fue el primero en sintetizar la aspirina a partir del ácido salicílico, pero este suceso permaneció en el olvido hasta 1898.

En 1860, Kolbe y Lautermann sintetizaron el ácido salicílico.

Félix Hoffmann, químico de la casa Bayer, tenía un padre artrítico que no toleraba los silicatos debido a que le provocaban fuerte irritación gastrointestinal. Esta circunstancia lo instó a buscar otros compuestos menos ácidos, llegando así a sintetizar el ácido acetilsalicílico (1898), que fue llamado Aspirina por la casa Bayer, por la "A" de acetilo y "spirin" del alemán spirsauere (1899).

El método sintético para la producción de aspirina es el usado en la actualidad y es el que presentaremos en este proyecto.

ORIGEN Y ACCESIBILIDAD A LA MATERIA PRIMA

Como se dijo anteriormente, en la corteza de sauce se encuentra el origen del ácido salicílico: una sustancia denominada salicilina. También se obtiene gracias a una planta denominada ULMARIA (Spiraea ulmaria)

TIPO DE REACTORES QUE SE UTILIZAN

Los reactores mas empleados son:

El **BATCH** fue usado en los inicios de la preparación del producto, sin embargo la productividad de este es baja por lo que actualmente el reactor mas empleado es el **SEMIBATCH**.

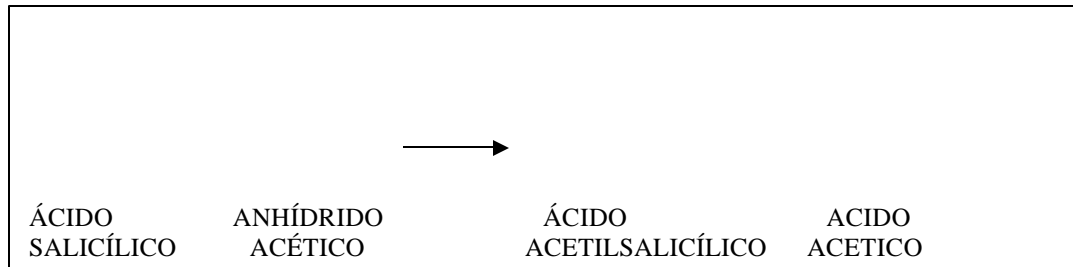
El **CSTR** también es una buena opción si lo que se requiere es un proceso continuo. Este será el que usaremos en el presente proyecto.

EXIGENCIAS EN CUANTO A LA CALIDAD DEL PRODUCTO OBTENIDO

Debido a que es un producto farmacéutico se exige un alto grado de pureza en el producto final.

En nuestro proceso consideraremos que el ácido acetilsalicílico obtenido es 100% puro.

CINÉTICA QUÍMICA



La reacción es elemental de orden 2.

$$-r_A = K C_A * C_B$$

B es el anhídrido acético

A es el ácido salicílico

$$-r_A = (156.8 \text{ mol/l} \cdot \text{h}) C_A * C_B$$

K fue hallada a 85 C, mediante análisis de datos encontrados en las patentes. (con ayuda del profesor.)

ANÁLISIS TERMODINAMICO

DATOS FISICOQUÍMICOS

?H f	entalpia de formación a 25 C.
?G f	Energia libre de gibbs a 25 C.
?H v	Calor de vaporización estandar.
Cp	Capacidad calorifica (Kj/mol)

ANHÍDRIDO ACÉTICO

$$?H f = -624.4 \text{ KJ/mol}$$

$$?G f = -489.14 \text{ KJ/mol}$$

$$?H v = 41.2 \text{ KJ/mol}$$

$$C_p = -23.13 + 0.5087 * T - 3.58e-4 * T^2 + 9.835e-8 * T^3$$

ACIDO ACETICO

$$\Delta H_f = -484.4 \text{ KJ/mol}$$

$$\Delta G_f = -390.2 \text{ KJ/mol}$$

$$\Delta H_v = 23.7 \text{ KJ/mol}$$

$$C_p = -36.0814 + 0.60468 * T - 3.993957e-4 * T^2 - 5.61602e-7 * T^3$$

ACIDO SALICILICO

$$\Delta H_f = -589.5 \text{ KJ/mol}$$

$$\Delta G_f = -418.1 \text{ KJ/mol}$$

$$C_p = -29.844 + 0.1326 * T - 2.867e-4 * T^2 + 1.347e-7 * T^3$$

ACIDO ACETILSALICILICO

Debido a que no se encontraron estos datos en la literatura, fueron calculados por contribución de grupos, por el método de Joback que ilustra el libro: "properties of gases and liquids".

El procedimiento realizado es el siguiente:

$$\Delta H_f = 68.29 + \sum \Delta H_f$$

$$\Delta H_f(298K) = -587.68 \text{ KJ/mol}$$

$$\Delta G_f(298K) = -53.88 + \sum \Delta G_f$$

$$\Delta G_f = -340.18 \text{ KJ/mol}$$

$$C_p = \left(\sum \Delta a - 37.93 \right) + \left(\sum \Delta b + 0.210 \right) * T + \left(\sum \Delta c - 3.91e-4 \right) * T^2 + \left(\sum \Delta d + 2.06e-7 \right) * T^3$$

$$C_p = -25.163 + 0.124682 * T - 2.557e-4 * T^2 + 1.183e-7 * T^3$$

Para calcular el calor de vaporización del ácido acetilsalicílico emplearemos la correlación de Pitzer :

$$\Delta H_v / R * T_c = 7.08 * (1 - Tr)^{0.354} + 10.95 * W * (1 - Tr)^{0.456}$$

Para calcular las condiciones críticas utilizaremos el método de Joback:

$$T_b = 198 + S \cdot b \quad (S \cdot b \text{ de la tabla 2-2 del Reid})$$

$$T_b = 601.53 \text{ K}$$

$$T_c = T_b [0.584 + 0.965 \cdot S \cdot T - (S \cdot T)^2]^{-1}$$

$$T_c = 817.13 \text{ K}$$

$$P_c = (0.113 + 0.0032 \cdot n_a - S \cdot p)^{-2}$$

n_a = número de átomos en la molécula ($C_9H_8O_4 = 21$)

$$P_c = 39.36 \text{ bar}$$

$$W = a / \beta$$

$$a = -\ln P_c - 5.92714 + 6.0996480 \cdot T^{-1} + 1.28862 \cdot \ln T - 0.169347 \cdot T^6$$
$$a = -1.74$$

$$\beta = 15.2518 - 15.6875 \cdot T^{-1} - 13.4721 \cdot \ln T + 0.43577 \cdot T^6$$
$$\beta = -1.86$$

$$W = 0.94$$

$$T_r = T / T_c$$

$$T_r = 298.15 / 817.13$$

$$T_r = 0.365$$

Por Pitzer

$$\Delta H_v(298\text{K}) = 97.6 \text{ KJ/mol}$$

CALCULO DEL CALOR DE REACCION ESTANDAR

$$\Delta H_{RXN} = \sum \Delta H_f^p - \sum \Delta H_f^r$$

Ecuación (1)

$$\Delta H_{RXN} = \Delta H_f \text{ ácido acetilsalicílico(sol)} + \Delta H_f \text{ ácido acético(liq)} - \Delta H_f \text{ ácido salicílico(sol)} - \Delta H_f \text{ anhídrido acético(liq)}$$

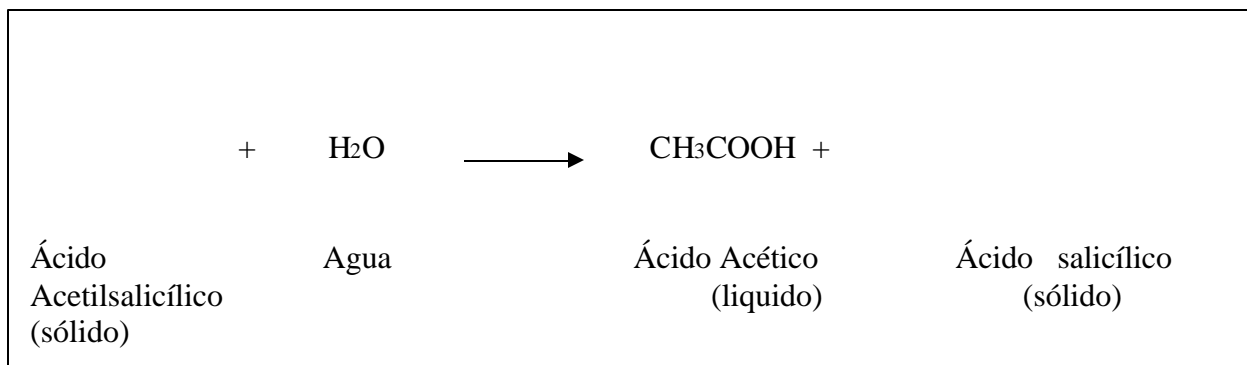
Para todas las sustancias presentes en la reacción, tenemos los valores en la fase correspondiente, a excepción del ácido acetilsalicílico que se encuentra en forma gaseosa, por lo cual plantearemos un camino termodinámico para llevarlo a sólido:

$$\Delta H_f(\text{sol}) = \Delta H_f(\text{gas}) - \Delta H_{\text{fusión}}(25\text{ C}) - \Delta H_{\text{vap}}(25\text{ C}) \quad \text{Ecuación(2)}$$

De esta ecuación no conocemos el $\Delta H_{\text{fusión}}$, y no fue posible calcularlo por contribución de grupos, por lo que utilizaremos una reacción del ácido acetilsalicílico que fue encontrada en INTERNET y despejaremos de allí el ΔH_f del ácido acetilsalicílico así:

Reacción :

$$\Delta H_{\text{reacción}} = - 27.2 \text{ KJ/mol a condiciones estándar.}$$



$$\Delta H_{RXN} = \Delta H_f \text{ ácido salicílico(sol)} + \Delta H_f \text{ ácido acético(liq)} - \Delta H_f \text{ agua(liq)} - \Delta H_f \text{ ácido acetilsalicílico(sol)} \quad \text{Ecuación(3)}$$

$$-27.2 \text{ KJ/mol} = -589.5 \text{ KJ/mol} + (-484.4 \text{ KJ/mol}) - (-280.83) - \Delta H_f \text{ ácido acetilsalicílico(sol)}$$

$$\Delta H_f \text{ ácido acetilsalicílico(sol)} = -765.87 \text{ KJ/mol}$$

Ahora reemplazando en la ecuación (1):

$$\Delta H_{\text{RXN}} = -765.87 \text{ KJ/mol} + (-484.4 \text{ KJ/mol}) - (-589.5 \text{ KJ/mol}) - (-624.4 \text{ KJ/mol})$$

$$\Delta H_{\text{RXN}} = -36.37 \text{ KJ/mol}$$

Este valor confirma la teoría encontrada, que afirma que la reacción es exotérmica.

ΔG_{RXN} lo calculamos de manera similar :

Ecuación (4)

$$\Delta G_{\text{RXN}} = \Delta G_f \text{ ácido acetilsalicílico(sol)} + \Delta G_f \text{ ácido acético(liq)} - \Delta G_f \text{ ácido salicílico(sol)} - \Delta G_f \text{ anhídrido acético(liq)}$$

Por contribución de grupos se encontró $\Delta G_f \text{ ácido acetilsalicílico (gas)} = -340.18 \text{ KJ/mol}$

Como lo necesitamos sólido debemos seguir un camino termodinámico así:

Ecuación (5)

$$\Delta G_f \text{ (sol)} = \Delta G_f \text{ (gas)} - \Delta H_{\text{fusión}}(25 \text{ C}) - \Delta H_{\text{vap}}(25 \text{ C})$$

De la ecuación 2, como ya se conoce el $\Delta H_f \text{ (sol)}$ del ac. acetilsalicílico, puede despejarse y hallar el valor del $\Delta H_{\text{fusión}}(25 \text{ C})$ para el mismo, obteniendo:

$$\Delta H_{\text{fusión}}(25 \text{ C}) = -578.68 \text{ KJ/mol} - 97.6 \text{ KJ/mol} - (-765.87 \text{ KJ/mol})$$

$$\Delta H_{\text{fusión}}(25 \text{ C}) = 89.6 \text{ KJ/mol}$$

Ahora reemplazando en la ecuación (5):

$$\Delta G_f \text{ (sol)} = -340.18 \text{ KJ/mol} - 89.6 \text{ KJ/mol} - 97.6 \text{ KJ/mol}$$

$$\Delta G_f(\text{sol}) = -527.38 \text{ KJ/mol}$$

Ahora en la ecuación (4) :

$$\Delta G_{\text{RXN}} = -527.38 \text{ KJ/mol} - 390.2 \text{ KJ/mol} - (-489.14 \text{ KJ/mol}) - (-418.1 \text{ KJ/mol})$$
$$\Delta G_{\text{RXN}} = -10.34 \text{ KJ/mol}$$

Para calcular el ΔG_{RXN} y el ΔH_{RXN} a diferentes temperaturas, se hizo un programa en Matlab, (Ver graficas).

La grafica del ΔH_{RXN} muestra que para la reacción este es negativo, lo cual ratifica una vez mas la exotermicidad de la reacción.

En cuanto a la grafica del ΔG_{RXN} se puede ver que después de los 340 K aproximadamente, se da con facilidad la reacción, por esta razón la temperatura de operación de 85 C es adecuada en principio para llevarla a cabo.

DEFINICIÓN DE CONDICIONES DE OPERACIÓN DEL PROCESO

La cantidad de ácido acetilsalicílico a producir será (de acuerdo a lo asignado por el profesor), la productividad mundial dividida en 250.

En el mundo se producen 50.000 toneladas de aspirina anuales, por lo tanto:

$$50.000\text{Ton/año}/250 = 200\text{Ton/año}$$

Calculando de este dato el valor correspondiente a la producción en un día, y luego por hora tenemos:

$$(200\text{Ton/año}) * (1\text{año}/360\text{días}) * (1\text{día}/24\text{h}) = 0.023 \text{ Ton/h}$$

Esta cantidad la ponemos en gramos:

$$(0.023\text{Ton/h}) * (907.185\text{Kg}/1\text{Ton}) = \mathbf{20.87\text{Kg/h}}$$

La conversión del proceso es de 0.8 con respecto al ácido salicílico. (Dato conocido por medio de las patentes encontradas para la producción de ácido acetilsalicílico).

Por comodidad los balances serán trabajados en moles, así que la producción por hora es convertido a moles por hora:

$$(20.87\text{Kg/h AAC}) * (1\text{Kmol}/180.157\text{Kg}) = 0.116\text{Kmol/h} = 116\text{mol/h}$$

CONVENCIONES

Ácido acetilsalicílico	AAC
Ácido salicílico	AS
Ácido acético	AC
Anhídrido acético	AnA

BALANCES DE MATERIA (MOLAR)

Basándose en el diagrama de flujo del proceso:

TABLA DE GRADOS DE LIBERTAD

	Mezclador	Reactor	Filtro1	Filtro2	Cristalizador	Secador	Global	Proceso
NVI.	4	6+1	11	12	8	4	13+1	29+1
NBMI	2	4	4	5	4	2	5	21
NFC	2			2			4	4
NCC								
NRC		1	3	1			1	5
GdeL.	0	2	4	4	4	2	4	0

NVI: Numero de variables independientes.

NBMI: Numero de balances materia independientes.

NFC: Numero de flujos conocidos.

NCC: Numero de composiciones conocidas.

NRC: Numero de relaciones conocidas.

GdeL: Grados de libertad.

ALGORITMO DE CALCULO

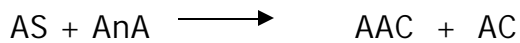
1. El mezclador tiene cero grados de libertad, puesto que por la estequiometria conocemos los flujos de entrada (N^1_{AS} , N^2_{AnA}). Resolviendo este conocemos, las corrientes de entrada al reactor.
2. Actualizando el reactor con las 2 corrientes conocidas del mezclador queda con cero grados de libertad, por lo que procedemos a resolverlo, y con la relación de conversión conocemos entonces, los 4 flujos de salida y la velocidad de reacción.
3. Continuando con el filtro 1, y con tres relaciones conocidas determinamos las variables de las corrientes 5 y 6 .
4. Actualizando el cristalizador con las variables conocidas en el filtro1 (corriente5) se puede resolver por balances sencillos.

5. Se resuelve el filtro 2 :planteando los balances y una relación para el porcentaje de humedad de la torta .
6. Por último se resuelve el secador y con el balance global se puede comprobar.

SOLUCION DE LOS BALANCES

MEZCLADOR

Por la estequiometria de la reacción (relacion1):



Como se requiere producir 116 mol/h de AAC entonces la alimentación de AS y AnA será de 144.8 mol/h para cada uno. (Esta alimentación es considerando que la conversión en el reactor es del 80%).

Por lo tanto: $N^1_{\text{AS}} = 144.8 \text{ mol/h}$, $N^3_{\text{AS}} = 144.8 \text{ mol/h}$,
 $N^2_{\text{AnA}} = 144.8 \text{ mol/h}$ $N^3_{\text{AnA}} = 144.8 \text{ mol/h}$,

REACTOR

Por la relación de conversión (relación 2):

$$r = (N^3_{\text{AS}} * X_{\text{AS}}) / -S_{\text{AS}}$$

$$r = (144.8 * 0.8) / -(-1)$$

$$r = 115.84 \text{ mol/h}$$

Planteando las ecuaciones de balance:

$$N^4_{\text{AS}} = N^3_{\text{AS}} - r = 144.80 \text{ mol/h} - 115.84 \text{ mol/h} = 29 \text{ mol/h.}$$

$$N^4_{\text{AnA}} = N^3_{\text{AnA}} - r = 29 \text{ mol/h.}$$

$$N^4_{\text{AAC}} = 0 + r = 115.84 \text{ mol/h.}$$

$$N^4_{\text{AC}} = 0 + r = 115.84 \text{ mol/h.}$$

$$N^4_{\text{total}} = 289.68 \text{ mol/h.}$$

FILTRO 1.

Planteamos los balances tomando el anhídrido como variable dependiente.

$$N^4 = N^5 + N^6 \quad \text{Balance total.}$$

$$N^4 \text{ AAC} = X^5 \text{ AAC} * N^5 \quad \text{Balance de AAC}$$

$$N^4 \text{ AS} = X^5 \text{ AS} * N^5 + N^6 \text{ AS} \quad \text{Balance de AS}$$

$$N^4 \text{ AC} = X^5 \text{ AC} * N^5 + N^6 \text{ AC} \quad \text{Balance de AC}$$

Como la relación de composición del AS y del AnA son iguales en la corriente 4 (relación 3) asumimos que esta se conserva en la corriente 5, entonces $X^5 \text{ AS} = X^5 \text{ AnA}$ además en la corriente 4 la relación de AC a AS es de 4 (relación 4); por la patente conocemos que la composición del AAC en la corriente 5 total es del 97% entonces:

$$X^5 \text{ AS} = 4 * X^5 \text{ AC}$$

$$X^5 \text{ AS} = X^5 \text{ AnA}$$

$$X^5 \text{ AS} + X^5 \text{ AC} + X^5 \text{ AnA} + 0.97 = 1$$

$$\text{Resolviendo: } X^5 \text{ AS} = 1.33\text{e-}2$$

$$X^5 \text{ AC} = 3.33\text{e-}2$$

$$X^5 \text{ AnA} = 1.33\text{e-}2$$

Como se que el % de AAC en el filtro es del 97% (Dato conocido por la patente.) (relación 5), entonces:

$$N^5 = 119.42 \text{ mol/h.}$$

$$N^6 = 170.26 \text{ mol/h.}$$

$$N^6 \text{ AC} = 111.86 \text{ mol/h.}$$

$$N^6 \text{ AS} = 27.41 \text{ mol/h}$$

$$N^6 \text{ AnA} = 27.41 \text{ mol/h}$$

$$N^5 \text{ AnA} = 1.59 \text{ mol/h}$$

$$N^5 \text{ AS} = 1.59 \text{ mol/h}$$

$$N^5 \text{ AC} = 3.98 \text{ mol/h}$$

$$N^5 \text{ AAC} = 115.84 \text{ mol/h}$$

CRISTALIZADOR

$$N^5 \text{ AnA} = N^7 \text{ AnA} = 1.59 \text{ mol/h} \quad \text{Balance de AnA}$$

$$N^5 \text{ AAC} = N^7 \text{ AAC} = 115.84 \text{ mol/h} \quad \text{Balance de AAC}$$

$$\begin{array}{lclcl} \mathbf{N}^5 \text{ AS} & = & \mathbf{N}^7 \text{ AS} & = & 1.59 \text{ mol/h} & \text{Balance de AS} \\ \mathbf{N}^5 \text{ AC} & = & \mathbf{N}^7 \text{ AC} & = & 3.98 \text{ mol/h} & \text{Balance de AC} \end{array}$$

FILTRO 2

$$\begin{array}{l} \mathbf{N}^8 \text{ AC} = 2 \text{ mol/h} \\ \mathbf{N}^9 \text{ H}_2\text{O} = 4 \text{ mol/h} \end{array}$$

El ácido acético agregado se utiliza para lavar la torta y retirar el anhídrido acético presente; y el agua añadida con el fin de retirar el ácido acético.

La torta que sale del filtro queda con un % de humedad del 8%.

$$\begin{array}{lcl} \mathbf{N}^7 \text{ AnA} & = & \mathbf{N}^{11} \text{ AnA} & \text{Balance de AnA} \\ \mathbf{N}^7 \text{ AAC} & = & \mathbf{N}^{10} \text{ AAC} & \text{Balance de AAC} \\ \mathbf{N}^7 \text{ AS} & = & \mathbf{N}^{11} \text{ AS} & \text{Balance de AS} \\ \mathbf{N}^7 \text{ AC} + \mathbf{N}^8 \text{ AC} & = & \mathbf{N}^{11} \text{ AC} & \text{Balance de AC} \\ \mathbf{N}^9 \text{ H}_2\text{O} & = & \mathbf{N}^{10} \text{ H}_2\text{O} + \mathbf{N}^{11} \text{ H}_2\text{O} & \text{Balance de agua} \end{array}$$

$$\begin{array}{lcl} \mathbf{N}^{11} \text{ AnA} & = & 1.59 \text{ mol/h} \\ \mathbf{N}^{10} \text{ AAC} & = & 115.84 \text{ mol/h} \\ \mathbf{N}^{11} \text{ AS} & = & 1.59 \text{ mol/h} \\ \mathbf{N}^{11} \text{ AC} & = & 5.98 \text{ mol/h} \end{array}$$

$$\begin{array}{lcl} \mathbf{N}^{10} \text{ H}_2\text{O} & = & 0.32 \text{ mol/h} \\ \mathbf{N}^{11} \text{ H}_2\text{O} & = & 3.68 \text{ mol/h} \end{array}$$

SECADOR

$$\begin{array}{lcl} \mathbf{N}^{13} \text{ H}_2\text{O} & = & \mathbf{N}^{10} \text{ H}_2\text{O} & \text{Balance de AnA} \\ \mathbf{N}^{12} \text{ AAC} & = & \mathbf{N}^{10} \text{ AAC} & \text{Balance de AAC} \end{array}$$

$$\begin{array}{lcl} \mathbf{N}^{13} \text{ H}_2\text{O} & = & 0.32 \text{ mol/h} \\ \mathbf{N}^{12} \text{ AAC} & = & 115.84 \text{ mol/h} \end{array}$$

GLOBALES

Podemos comprobar con cualquiera de los balances, con el ácido acético por ejemplo:

$$N^8AC = N^{11}AC + N^6AC - r$$

$$2\text{mol/h} = 5.98\text{mol/h} + 111.86\text{mol/h} - 115.84$$

$$2\text{mol/h} = 2\text{mol/h}$$

DISEÑO DEL REACTOR

CONVENIENCIA DE UN REACTOR ISOTÉRMICO O NO ISOTÉRMICO

Por la información de la patente y los aportes de la literatura se escoge un reactor isotérmico, sin embargo los efectos de la temperatura sobre este serán analizados posteriormente.

ECUACIÓN DE DISEÑO EN FUNCIÓN DEL TIPO DE REACTOR

Para un reactor **CSTR** la ecuación de diseño es:

Ecuación

$$V = \frac{F_{A0} * X}{-r_A}$$

La velocidad de reacción del ácido salicílico es

$$-r_A = K C_A * C_B \quad \text{Ecuación 7.}$$

$$K = 156.8 \text{ mol/l}^*h \quad (\text{a } 85 \text{ } ^\circ\text{C})$$

CALCULO DEL VOLUMEN DEL REACTOR

Combinando la ecuación 6 y la ecuación 7:

$$V = \frac{F_{A0} * X}{K * C_A * C_B} \quad \text{Ecuación 8.}$$

$$C_A = C_{A0} * (1 - X)$$

$$C_B = C_{A0} * (\theta_B - X)$$

Como la reacción es en fase líquida $v = v_0$
 $\theta_B = 1$, entran en proporción estequiométrica.

Reemplazando en la ecuación 8.

$$V = \frac{FAO * X}{K * CAO^2 * (1-X)^2} \quad \text{Ecuación 9.}$$

$$FAO = CAO * v_o \quad \text{Ecuación 10.}$$

Reemplazando 10 en 9:

$$V = \frac{CAO * v_o * X}{K * CAO^2 * (1-X)^2}$$

$$\frac{V}{v_o} = \frac{X}{K * CAO * (1-X)^2}$$

$$t = \frac{X}{K * CAO * (1-X)^2} \quad \text{Ecuación 11.}$$

Se conoce el tiempo de residencia por el dato de la patente, por lo que puede determinarse la concentración inicial de A.

$$1.5h = \frac{0.8}{(156.8 \text{ mol/l} \cdot h) * CAO * (1-0.8)^2}$$

$$CAO = 0.085 \text{ mol/l}$$

Con esta concentración, y como se conoce el flujo molar a la entrada se puede hallar el flujo volumétrico:

$$\begin{aligned} FAO/CAO &= v_o \\ (144.8 \text{ mol/h}) / 0.085 \text{ mol/l} &= 1703.5 \text{ l/h} \end{aligned}$$

Como $t = V/v_0$ entonces puedo determinar el volumen del reactor CSTR:

$$V = 1.5h \cdot 1703.5l/h$$

$$V = 2555.3 \text{ l.}$$

CALCULO DE VARIABLES DE SALIDA

$$C_A = C_{A0} \cdot (1-X) = (0.085 \text{ mol/l}) \cdot (1-0.8) = 0.017 \text{ mol/l}$$

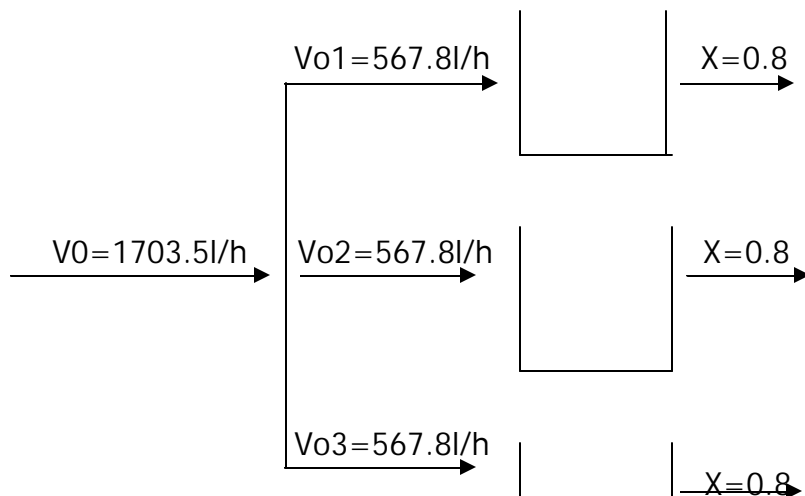
$$C_B = C_{A0} \cdot (1-X) = (0.085 \text{ mol/l}) \cdot (1-0.8) = 0.017 \text{ mol/l}$$

$$F_A = C_A \cdot v_0 = (0.017 \text{ mol/l}) \cdot (1703.5 \text{ l/h}) = 29 \text{ mol/h}$$

$$F_B = 29 \text{ mol/h}$$

Se observa que el volumen calculado es 2.6 m^3 por lo que se cree que puede ser conveniente utilizar reactores en paralelo, ya que con un reactor tan grande la agitación sería más complicada, sin embargo habría que analizarse los costos aproximados de los reactores.

A continuación plantearemos el esquema para 3 reactores en paralelo:



El volumen de cada reactor será el volumen total sobre el número de reactores: $2555.3 \text{ l} / 3 = 852 \text{ l}$.

Para el reactor 1:

$$V_1 = C_{A0} \cdot v_{o1} \cdot X$$

$$K \cdot CA_0^2 \cdot (1-X)^2$$

$$851.771 \text{ l} = \frac{(0.085 \text{ mol/l}) \cdot (567.8) \cdot X}{(156.8) \cdot (0.085 \text{ mol/l})^2 \cdot (1-X)^2}$$

$$\mathbf{X = 0.8}$$

La conversión obtenida es de 0.8 que será igual para cada reactor.
Por lo tanto poner los 3 reactores en paralelo permitirá realizar una mejor agitación puesto que se hace mas manejable un volumen menor de reactor; y las variables de salida no se verán afectadas.

BIBLIOGRAFÍA

1. FOGLER, SCOTT Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Tercera edición.
2. FESSENDEN, Química orgánica
3. REID, Properties of gases and liquids. Cuarta edición.
4. DENBAY, Introducción a la teoría del diseño de reactores.
5. INTERNET (www.espacenet.com, www.nist.gov).