

# UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

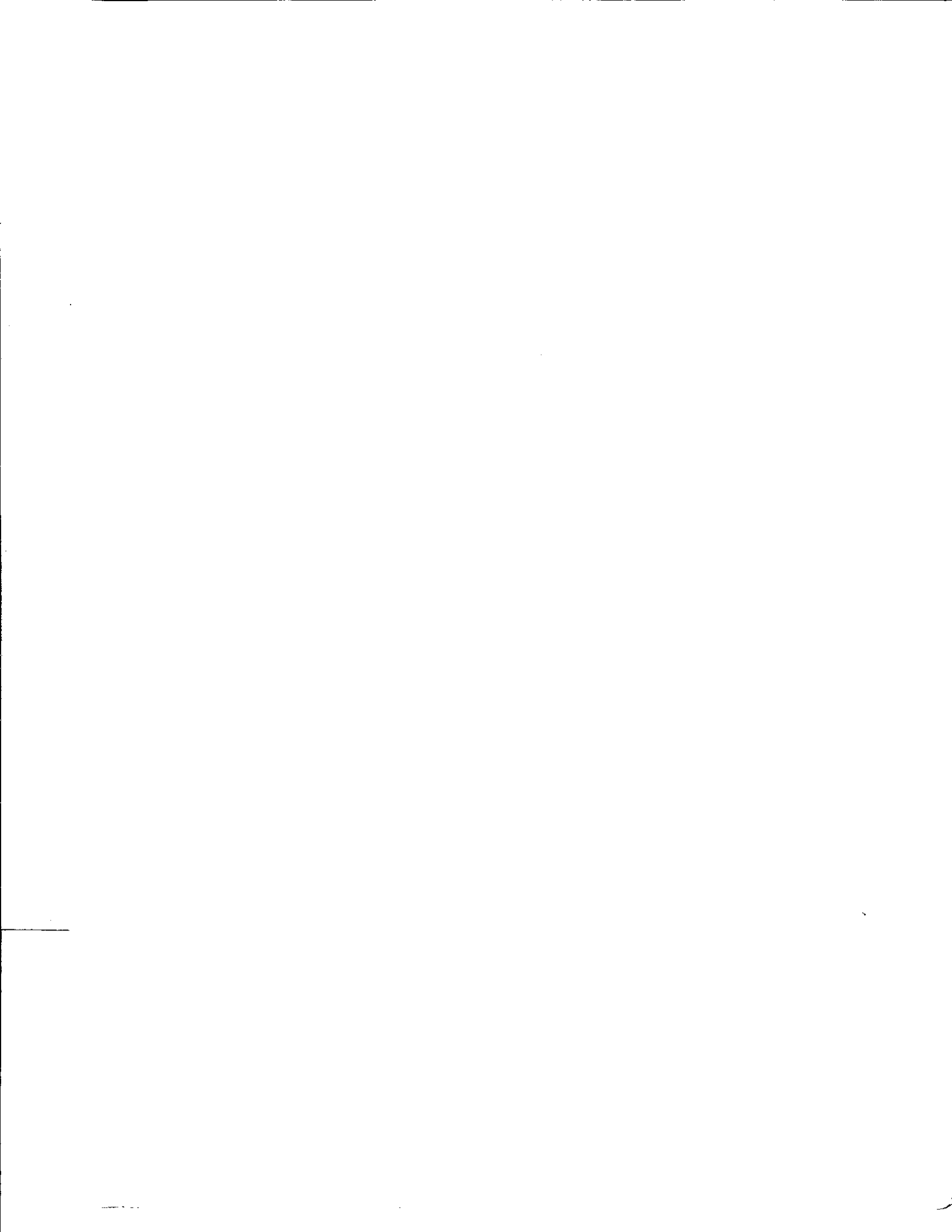
Facultad de Ciencias y Humanidades

Diseño de un reactor para la neutralización de ácido  
dodecilbencensulfónico en plantas de fabricación de  
jabones y detergentes en Guatemala

Trabajo de investigación presentado para optar al grado  
académico de Licenciado en Ingeniería Química por  
Luis Ernesto Núñez González

Guatemala  
2005

BIBLIOTECA  
DE LA  
UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA



Diseño de un reactor para la neutralización de ácido  
dodecylbencensulfónico en plantas de fabricación de  
jabones y detergentes en Guatemala

# UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ciencias y Humanidades

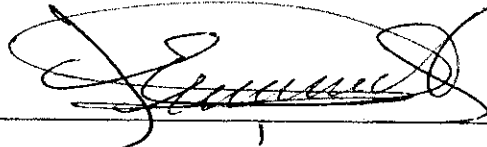
Diseño de un reactor para la neutralización de ácido  
dodecylbencensulfónico en plantas de fabricación de  
jabones y detergentes en Guatemala

Trabajo de investigación presentado para optar al grado  
académico de Licenciado en Ingeniería Química por  
Luis Ernesto Núñez González

Guatemala  
2005

Vo. Bo.:

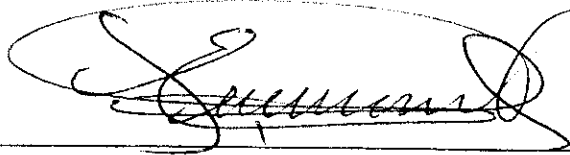
(f)



Ingeniero José Eduardo Calderón  
Asesor

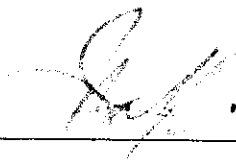
Tribunal:

(f)



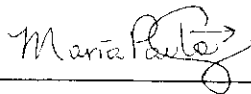
Ingeniero José Eduardo Calderón

(f)



Ingeniero Federico Salazar

(f)



Ingeniera María Paula Chávez

Fecha de Aprobación: 13 de Enero de 2005

A Dios  
A mis Padres, Hermana y Abuelos  
A mi Vida

## RESUMEN

El presente trabajo tiene como objetivo el diseñar un reactor continuo agitado para la neutralización del ácido dodecibencensulfónico con hidróxido de sodio, para la producción de jabones y detergentes, en una fábrica de estos productos, en Guatemala. Para esto, se realizaron análisis en el laboratorio, que permitieron estimar los valores de capacidades caloríficas y calores estándar de reacción, con procedimientos diseñados para la obtención de datos experimentales. Estos datos fueron empleados posteriormente, para la estimación de la ecuación de la cinética de reacción. Y los datos de cinética, a la vez se emplearon para los cálculos del volumen necesario del reactor, que es la información base para el diseño y dimensionamiento del equipo requerido. Además de los datos técnicos, se realizó una estimación de costos de equipo y de los tiempos necesarios para la recuperación de la inversión de capital necesaria, por medio de los beneficios económicos que se obtienen de la instalación del reactor.

Luego de efectuados los cálculos, pudo establecerse el volumen del reactor continuo agitado necesario para la neutralización del ácido dodecibencensulfónico, que fue de  $8.11 \text{ m}^3$  (8110 L), lo cual permitió el cálculo de un sistema de agitación, con un rodete de 6 palas inclinadas a  $45^\circ$  y de una chaqueta de enfriamiento de  $27.8 \text{ m}^2$  de área de intercambio de calor. Estos componentes se diseñaron para permitir la agitación continua y la operación isotérmica e isobárica, a una temperatura estable de  $65^\circ\text{C}$  y una presión de 85.3 kPa.

Finalmente, pudo concluirse que la construcción de un reactor continuo agitado isotérmico e isobárico, para la neutralización del ácido dodecibencensulfónico, es factible técnicamente y económicamente; que el tiempo de recuperación de la inversión necesaria es relativamente corto, y que económicamente la principal ventaja de la instalación del reactor continuo agitado es el ahorro en el desperdicio de materiales necesarios en la operación actual, lo que a su vez produce mejoras en la calidad de los productos.

## ÍNDICE GENERAL

	Página
PREFACIO .....	iii
RESUMEN .....	iv
ÍNDICE GENERAL .....	v
ÍNDICE DE TABLAS .....	viii
ÍNDICE DE GRÁFICAS .....	xiii
ÍNDICE DE FIGURAS .....	xiv
Capítulos:	
I. INTRODUCCIÓN .....	1
II. ANTECEDENTES .....	3
A. Cinética química .....	3
1. Factores que modifican la velocidad de reacción .....	3
2. Velocidad de reacción .....	6
3. Estudio de las reacciones químicas .....	7
B. Diseño de reactores .....	15
1. Definición de reacción química .....	15
2. Tipos de reacciones químicas .....	15
3. Definición de reactor químico .....	16
4. Tipos de reactores químicos .....	16
5. Ecuación de balance de moles .....	17
6. Ecuaciones de diseño de los diferentes tipos de reactores químicos .....	19
7. Conversión y tamaño de los reactores .....	22
8. Diseño de reactores simples .....	25
C. Principios de termodinámica .....	27
1. Capacidad calorífica .....	27
2. Calor estándar de reacción .....	28
D. Proceso de producción de detergentes en polvo .....	31
1. Definición de detergente .....	32
2. Etapas del proceso de producción de detergente .....	32
E. Proceso de producción de jabones en barra, cremas lavaplatos y productos limpiadores .....	35
1. Definiciones .....	35
2. Formulación .....	35
3. Proceso de producción de jabones sintéticos .....	36

III. JUSTIFICACIÓN .....	38
IV. OBJETIVOS .....	39
V. PROBLEMA .....	40
VI. METODOLOGÍA .....	41
VII. RESULTADOS .....	42
VIII. DISCUSIÓN .....	48
IX. CONCLUSIONES .....	54
X. RECOMENDACIONES .....	55
XI. BIBLIOGRAFÍA.....	56
XII. APÉNDICES .....	57
Apéndice A: Datos obtenidos para los cálculos analíticos y el diseño de la fórmula a emplear en la neutralización.....	57
Apéndice B: Datos obtenidos para la experimentación a escala laboratorio.....	60
Apéndice C: Datos obtenidos para el diseño del equipo y para los costos de producción e inversión necesaria en maquinaria y equipo.....	66
Apéndice D: Diagramas de los sistemas empleados a escala laboratorio y del equipo diseñado para neutralización del ácido dodecilbencensulfónico.....	67
Apéndice E: Datos calculados para la obtención de las posibles fórmulas a utilizar en el reactor de neutralización.....	69
Apéndice F: Datos calculados y gráficas empleadas para la obtención de los calores específicos de reacción y disolución, y las capacidades caloríficas específicas de cada uno de los compuestos utilizados.....	70
Apéndice G: Datos calculados y gráficas empleadas para la obtención de la cinética aparente de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico....	74
Apéndice H: Datos calculados y especificaciones de diseño de la maquinaria y equipo utilizados en la neutralización del ácido sulfónico.....	78

Apéndice I: Datos calculados para el análisis económico efectuado.....	81
Apéndice J: Métodos analíticos empleados en la evaluación de los parámetros físicoquímicos de las fórmulas.....	83
Apéndice K: Métodos diseñados en la obtención experimental de los resultados buscados.....	88
Apéndice L: Cálculo de muestra del método de evaluación experimental de la cinética de reacción.....	90
Apéndice M: Cálculo de muestra del método de diseño del reactor continuo agitado y de la evaluación económica realizada.....	97

## ÍNDICE DE TABLAS

	Página
Tabla No. 1 Calores estándar de formación de algunas sustancias	30
Tabla No.2 Resultados obtenidos experimentalmente para la viscosidad de la solución de dodecilbencensulfonato de sodio al 58.7% (p/p), con respecto a la temperatura de la misma	42
Tabla No.3 Resultados obtenidos experimentalmente para la fórmula de fabricación de la pasta de dodecilbencensulfonato de sodio concentrado al 58.7% (p/p)	42
Tabla No.4 Resultados obtenidos experimentalmente para el calor estándar de disolución de la soda cáustica al 50% (p/p), así como para el calor estándar de reacción del ácido dodecilbencensulfónico con soda cáustica disuelta	42
Tabla No.5 Resultados obtenidos experimentalmente para las ecuaciones de determinación de las capacidades caloríficas específicas en función de la temperatura	42
Tabla No.6 Resultados obtenidos experimentalmente para la ecuación aparente de la cinética de reacción obtenida	43
Tabla No.7 Resultados obtenidos experimentalmente para el diseño de los diferentes equipos necesarios en la reacción de neutralización	43
Tabla No.8 Resultados obtenidos experimentalmente para el análisis de los beneficios obtenidos con el empleo del reactor de neutralización, así como para la inversión necesaria en maquinaria y equipo	43
Tabla No.9 Datos obtenidos para las especificaciones de la base (pasta concentrada de dodecilbencensulfonato de sodio) requeridas en plantas de jabones y detergentes	57
Tabla No.10 Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la fórmula No.1, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c	57
Tabla No.11 Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la fórmula No.2, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c	58

Tabla No.12	58
Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la fórmula No.3, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c	
Tabla No.13	58
Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la fórmula No.4, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c	
Tabla No.14	59
Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la fórmula No.5, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c	
Tabla No.15	59
Datos obtenidos para la viscosidad de la pasta producida con la fórmula No. 3 en función de la temperatura, por medio del viscosímetro GE modelo L-250	
Tabla No.16	60
Datos obtenidos para los pesos de agua, soda cáustica al 50%(m/m), ácido sulfónico lineal y dodecilsulfonato de sodio al 58.7% (m/m), utilizados en las pruebas realizadas en el sistema de la figura No.17, esto por medio de la balanza Sartorius modelo 8164	
Tabla No.17	60
Datos obtenidos para la capacidad calorífica específica del agua en función de la temperatura (Perry R. 1997)	
Tabla No.18	61
Datos obtenidos para la temperatura del agua empleada en el sistema de la figura No.17 en función de la temperatura del ácido dodecilsulfónico Lineal, para la determinación de la capacidad calorífica específica del ácido	
Tabla No.19	61
Datos obtenidos para la temperatura del agua empleada en el sistema de la figura No.17 en función de la temperatura del dodecilsulfonato de sodio, para la determinación de la capacidad calorífica específica de la sal en solución	
Tabla No.20	62
Datos obtenidos para la temperatura del agua empleada en el sistema de la figura No.17 en función de la temperatura de la soda cáustica al 50% (p/p), para la determinación de la capacidad calorífica específica de la base en solución	
Tabla No.21	62
Datos obtenidos para el cálculo de la entalpía o calor de disolución de la soda cáustica al 50% (p/p) en agua tratada, esto por medio de la balanza Sartorius modelo 8164	

Tabla No.22	63
Datos obtenidos para el cálculo de la entalpía de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico con soda cáustica diluida al 15.6% (p/p), esto por medio de la balanza Sartorius modelo 8164	
Tabla No.23	63
Datos obtenidos para las condiciones de operación de las corridas realizadas en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico, por medio de la balanza Sartorius modelo 8164	
Tabla No.24	63
Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la primera corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico	
Tabla No.25	64
Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la segunda corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico	
Tabla No.26	64
Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la tercera corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico	
Tabla No.27	65
Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la cuarta corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico	
Tabla No.28	65
Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la quinta corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico	
Tabla No.29	66
Datos obtenidos para el diseño del reactor de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico con soda cáustica	
Tabla No.30	66
Datos obtenidos para la estimación de los beneficios económicos obtenidos con la instalación del reactor de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico	
Tabla No.31	66
Datos obtenidos para los costos de las horas hombre de los diferentes niveles de operador, así como para la cantidad de operadores empleados en el proceso actual, y con el empleo del reactor continuo agitado	

Tabla No.32	69
Datos calculados para obtención de las fórmulas propuestas a emplear en la neutralización del ácido dodecilbencensulfónico con soda cáustica	
Tabla No.33	69
Datos calculados para los resultados de los análisis fisicoquímicos obtenidos a partir de cada una de las fórmulas propuestas	
Tabla No.34	69
Datos calculados para obtención de la viscosidad de la pasta fabricada a partir de la fórmula propuesta No.3, en función de la temperatura	
Tabla No.35	70
Datos calculados para la obtención de la capacidad calorífica específica del ácido dodecilbencensulfónico en función de la temperatura	
Tabla No.36	70
Datos calculados para la obtención de la capacidad calorífica específica del dodecilbencensulfonato de sodio en función de la temperatura	
Tabla No.37	71
Datos Calculados para la obtención de la capacidad calorífica específica de la soda cáustica al 50%(p/p) en función de la temperatura	
Tabla No.38	71
Datos calculados para la obtención del calor estándar de disolución de la soda cáustica al 50%(p/p) en agua tratada	
Tabla No.39	72
Datos calculados para la obtención del calor estándar de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico	
Tabla No. 40	76
Datos calculados para la obtención de los parámetros a graficar en el método de las velocidades iniciales de reacción	
Tabla No.41	77
Datos calculados para la obtención de la ecuación que relaciona la velocidad de reacción con la concentración de ácido sulfónico en solución	
Tabla No.42	78
Datos calculados para el diseño inicial del reactor continuo agitado a construir	
Tabla No.43	78
Datos calculados para el diseño del reactor continuo agitado a construir con las consideraciones necesarias de materiales de construcción	
Tabla No.44	78
Datos calculados para el diseño del sistema de agitación del reactor de neutralización del ácido sulfónico lineal	

Tabla No.45 Datos calculados para el diseño del sistema de enfriamiento del reactor continuo agitado	79
Tabla No.46 Especificaciones del motor a emplear para el movimiento del sistema de agitación del reactor continuo agitado	79
Tabla No.47 Especificaciones del agitador a emplear en el reactor continuo agitado	79
Tabla No.48 Especificaciones del variador de frecuencias y del arrancador a emplear con el motor del sistema de agitación del reactor continuo agitado	80
Tabla No.49 Especificaciones del medidor de flujo a utilizar en los caudales de soda caústica, ácido sulfónico y agua a utilizar	80
Tabla No.50 Especificaciones de los medidores de temperatura a utilizar en el reactor continuo agitado	80
Tabla No.51 Especificaciones del indicador de nivel a utilizar en el reactor continuo agitado	80
Tabla No.52 Datos calculados para la estimación de costos de compra del equipo a emplear en el reactor continuo agitado	81
Tabla No.53 Datos calculados para la determinación de los beneficios económicos obtenidos en lo que respecta a mano de obra, con la instalación del reactor continuo agitado	81
Tabla No.54 Datos calculados para la estimación de costos de compra, instalación, instrumentación y automatización del equipo a emplear en el reactor continuo agitado	82
Tabla No.55 Datos calculados para la determinación de los beneficios económicos obtenidos con la instalación del reactor continuo agitado	82

## ÍNDICE DE GRÁFICAS

	Página
Gráfica No.1 Capacidad calorífica del ácido dodecilbencensulfónico con respecto a la temperatura de trabajo	72
Gráfica No.2 Capacidad calorífica del dodecilbencensulfonato de sodio con respecto a la temperatura de trabajo	73
Gráfica No.3 Capacidad calorífica de la soda caústica al 50% (p/p) con respecto a la temperatura de trabajo	73
Gráfica No.4 Distribución de temperatura con el tiempo para la primera corrida realizada en la determinación de la cinética de reacción	74
Gráfica No.5 Distribución de temperatura con el tiempo para la segunda corrida realizada en la determinación de la cinética de reacción	74
Gráfica No.6 Distribución de temperatura con el tiempo para la tercera corrida realizada en la determinación de la cinética de reacción	75
Gráfica No.7 Distribución de temperatura con el tiempo para la cuarta corrida realizada en la determinación de la cinética de reacción	75
Gráfica No.8 Distribución de temperatura con el tiempo para la quinta corrida realizada en la determinación de la cinética de reacción	76
Gráfica No.9 Gráfica logarítmica de la velocidad de reacción contra la concentración inicial	77
Gráfica No.10 Números de potencia de sistemas agitados, en función del número de Reynolds manejado	104

## ÍNDICE DE FIGURAS

	Página
Figura No. 1 Sistemas agitados y estáticos.....	4
Figura No. 2 Efectos del aumento de presión en sistemas gaseosos.....	5
Figura No. 3 Diagrama de la energía de las diferentes especies que participan en una reacción	8
Figura No. 4 Balance en el volumen del sistema.....	18
Figura No. 5 Volumen dividido del sistema de reacción.....	18
Figura No. 6 Esquema base de un CSTR.....	20
Figura No. 7 Esquema base de un PFR.....	21
Figura No. 8 Estructura química del Saponin de la <i>Acacia Auriculiformis</i> (jabón natural).....	31
Figura No. 9 Síntesis de ABS.....	32
Figura No. 10 Esquema de equipo de un proceso de fabricación de detergente.....	34
Figura No. 11 Mezclador Sigma.....	37
Figura No. 12 Esquema del reactor continuo agitado y del sistema de agitación a construir (vista frontal).....	44
Figura No. 13 Esquema del Reactor continuo agitado y del sistema de agitación a construir (vista de planta).....	45
Figura No. 14 Esquemas de vista de planta del reactor continuo agitado, incluyendo el sistema de agitación.....	46

Figura No. 15 Diagrama de la soportaría empleada en el reactor a construir.....	47
Figura No. 16 Diagrama del sistema de control de agitación del reactor continuo agitado empleado en la neutralización del ácido dodecilbencensulfónico.....	67
Figura No. 17 Diagrama del sistema de control del reactor continuo agitado empleado en la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico.....	67
Figura No. 18 Diagrama del sistema utilizado en la determinación de la capacidad calorífica específica de las sustancias empleadas en la formulación.....	68
Figura No. 19 Diagrama del sistema utilizado a escala de laboratorio para la determinación de los calores estándar de reacción y de la cinética de la neutralización .....	68
Figura No. 20 Balanza analítica empleada en el método analítico especificado.....	84
Figura No. 21 Balanzas de humedad empleadas en el análisis.....	85
Figura No. 22 Viscosímetro empleado en los análisis.....	86
Figura No. 23 Medición de pH de una muestra líquida.....	87
Figura No. 24 Patrones de flujo presentados por recipientes agitados axialmente con deflectores	102
Figura No. 25 Patrones de flujo presentados por recipientes agitados radialmente con deflectores.....	102
Figura No. 26 Sistema de enfriamiento con chaqueta.....	105

# I. INTRODUCCIÓN

En toda cultura se buscaba encontrar medios de limpieza para los diferentes instrumentos que el ser humano ha empleado. Los primeros impulsos del hombre lo llevaron a enjuagar los objetos en las corrientes de agua de ríos, lagos o mares, lo cual le trajo el beneficio de poder eliminar manchas o suciedad. Sin embargo, no todas las manchas podían removerse de esta manera, así que sin conocer la química del proceso, el hombre empezó a adicionar sustancias naturales hasta encontrar las que mejores resultados le proporcionaron.

Luego de esto, el hombre empezó a tratar de generar el jabón por medios artificiales y fue así como en Babilonia se obtiene por primera vez un jabón fabricado por el hombre. Esta fabricación fue pasando como tradición a través de las generaciones y fue desarrollándose en cada tiempo. En la época industrial, continuó creciendo en grandes proporciones y se diversificó por medio del auge de la industria petrolera, que permitió la síntesis de jabones a partir de residuos de la destilación del petróleo. Esta diversificación trajo consigo la principal división de los productos de limpieza, que son los productos sintetizados a partir del petróleo, conocidos como jabones sintéticos, y los productos elaborados a partir de reacciones de saponificación.

Actualmente, la mayoría de productos de limpieza, a excepción de aquellos que se destinan a la higiene personal, utilizan como base de sus formulaciones los denominados jabones sintéticos, lo cual se debe principalmente a las ventajas que estos tienen, que se refieren a su mayor compatibilidad con aguas duras y a su precio. La primera se debe a que en aguas duras los jabones sintéticos, a diferencia de los otros, tienen una mayor resistencia a precipitar o formar natas, las que generalmente se adhieren a los objetos y les cambian la apariencia o les confieren mal olor. Mientras tanto, su bajo precio se debe a que las cadenas carbonadas, que sirven de base a la mayoría de estructuras jabonosas, suelen extraerse de la polimerización de subproductos de la destilación del petróleo, que presentan un precio aceptable en el mercado internacional, como es el caso del propileno. A pesar de esto, los jabones sintéticos tienen la gran desventaja de que suelen ser contaminantes del agua con poca biodegradabilidad, lo que lleva a tener que removerlos por medios especiales de las aguas muy contaminadas. También debe mencionarse, que este tipo de jabones posee un considerable poder abrasivo y corrosivo, lo que les limita su uso concentrado, en superficies resistentes.

Ahora bien, las industrias guatemaltecas de fabricación de productos de limpieza emplean varios métodos de producción de agentes limpiadores, los cuales tienen una característica en común, que es la utilización de dodecilsulfonato de sodio o de potasio como ingrediente activo de los agentes limpiadores. El empleo de esta sal lleva a tener que adquirirla o a tener que fabricarla a partir del ácido dodecilsulfónico y su reacción de neutralización con hidróxido de sodio o de potasio. El ácido, a su vez, puede sintetizarse a partir de propileno, benceno y ácido sulfúrico.

Luego de generado el ingrediente activo, este se combina con diferentes materiales, que le proveen de las propiedades necesarias para que éste se integre a la suciedad y la solubilice. Por medio de diferentes tratamientos, la combinación de materiales produce líquidos, polvos granulares, pastas y sólidos, que se emplean popularmente en los trabajos de limpieza a mano.

En lo que respecta a la producción de dodecibencensulfonato de sodio, la industria nacional no posee métodos controlados de producción, por lo que simplemente se mezclan el ácido con la base, para dar como resultado una sal; este proceso se efectúa por lo regular en tanques no controlados, o mezcladores de pastas, que facilitan la adición del resto de componentes de cada producto limpiador. Sin embargo, esto trae consecuencias graves por la poca controlabilidad de la reacción, que en muchos casos presenta riesgos a la seguridad industrial, mientras que en muchos otros, representa una inversión extra, al tener que desechar grandes cantidades de producto terminado o al tener que emplear materiales adicionales a la fórmula para compensar los lotes, que por los errores de control, se salen de las especificaciones establecidas, pudiendo llegar en ciertos casos, a presentar riesgos para la salud de los consumidores que los empleen.

El estudio que se realizó en una planta de fabricación de agentes limpiadores, tuvo por objeto proporcionar las dimensiones y cantidades de equipos necesarios para la construcción de un reactor químico continuo controlado, que produzca dodecibencensulfonato de sodio en forma líquida, para todos los productos que lo lleven en su fórmula. Además, se tuvo como propósito, el proporcionar un análisis de los costos involucrados en la construcción del reactor, para determinar la factibilidad de sustituir los sistemas actuales por el propuesto.

## II. ANTECEDENTES

### A. Cinética química

La cinética química estudia la velocidad de reacción de los procesos químicos en función de la concentración de las especies que reaccionan, de los productos de reacción, de los catalizadores e inhibidores, de los diferentes medios disolventes, de la temperatura, y de todas las demás variables que pueden afectar a la velocidad de una reacción.

Cuando algunas sustancias reaccionan, lo hacen en forma lenta, por ejemplo el hierro en presencia de aire; otras reaccionan rápidamente, como por ejemplo el sodio también en presencia de aire; y hay sustancias como el papel en presencia de aire que no reaccionaran jamás sin el auxilio del fuego, pero una vez comenzada la reacción ésta se desarrolla rápidamente.

Entonces, tanto para que una reacción ocurra, como para modificar su velocidad, se deberán tener en cuenta varios factores (Perry, 1997).

1. Factores que modifican la velocidad de las reacciones: Para que dos sustancias reaccionen, sus moléculas, átomos o iones deben chocar. Estos choques producen un nuevo ordenamiento electrónico y, por consiguiente un nuevo ordenamiento entre sus enlaces químicos, originando nuevas sustancias.

A partir de esto, pueden explicarse varios factores que afectan de diferentes maneras a las velocidades de reacción:

a. Temperatura: Según la teoría cinética, la temperatura aumenta la energía cinética de las moléculas o iones y por consiguiente el movimiento de estos, con lo cual, aumenta la posibilidad de choques entre las moléculas o iones de los reactivos, aumentando la posibilidad de que ocurra la reacción o acelerando una reacción en desarrollo.

Sin embargo, el incremento de la velocidad de la reacción no depende tanto del incremento del número de colisiones, cómo del número de moléculas que han alcanzado la energía de activación.

La velocidad de una reacción generalmente crece con la temperatura, y se duplica, aproximadamente, por cada 10 °C que aumenta la misma.

Es importante mencionar que la temperatura es en realidad una medida de la energía térmica del sistema, con lo que, al aumentar la temperatura, se le estará proporcionando una mayor energía, lo que hará posible que las reacciones venzan la barrera de la energía de activación.

b. Superficie de contacto: Cuando una o todas las sustancias que se combinan se hallan en distintos estados, la velocidad de reacción depende de la superficie expuesta en la misma. Por ejemplo, si se buscara la reacción de un sólido, debería considerarse que cuando los sólidos están molidos o en granos, aumenta la superficie de contacto, es decir, que aumenta la posibilidad de choque y por lo tanto la reacción es más veloz.

Lo mismo ocurre cuando las sustancias reaccionantes no son miscibles entre sí, como por ejemplo, en la hidrólisis neutra de un aceite, se hace reaccionar éste con agua, para lograrlo, el agua de la parte inferior se recircula hacia la parte superior rociándola sobre la superficie del aceite.

c. **Agitación:** La agitación es una variante del punto anterior, lo que se logra agitando las sustancias reaccionantes, es mezclar íntimamente los reactivos aumentando la superficie de contacto entre ellos.

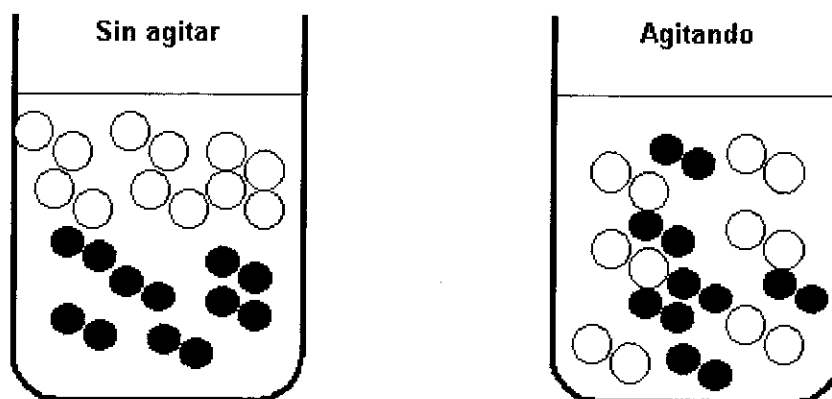


Figura No. 1. Sistemas agitados y estáticos

En otras palabras, la agitación es otra forma de energía agregada al sistema, que provocará un aumento de la energía cinética molecular, lo que a su vez desembocará en un aumento en la velocidad de reacción.

d. **Energía lumínica:** Hay reacciones que en la oscuridad son muy lentas, como por ejemplo, la combinación del hidrógeno con el cloro. La luz solar acelera la reacción de modo tal, que a la luz solar directa, la reacción se hace explosiva. Lo mismo ocurre en la formación de glúcidos por los vegetales verdes a partir del agua y el dióxido de carbono en la fotosíntesis.

Este fenómeno se explica de la misma manera que en los casos anteriores. Sin embargo, es un factor muy especial, ya que dependiendo del sistema, así será la capacidad que éste tenga para absorber o utilizar la energía lumínica. En otras palabras, la exposición de diferentes sistemas a una misma fuente de luz, no tendrá los mismos efectos sobre las velocidades de reacción de cada uno de ellos.

e. **Concentración:** La velocidad de una reacción química es proporcional a la concentración en moles por litro (moles/litro) de las sustancias reaccionantes. Esto se debe a que a mayores cantidades de reactivos, las posibilidades de choque de las moléculas aumentan, con lo que, a pesar de que la concentración no modifica directamente la cinética molécula, afecta la velocidad de reacción, dada la probabilidad de choque.

Si las sustancias que reaccionan son gaseosas, la concentración de las mismas aumenta disminuyendo el volumen, lo que se logra aumentando la presión. Es decir, que en las soluciones líquidas, la presión tendrá un efecto que en muchos casos es despreciable, por tratarse de sustancias que suelen considerarse como incompresibles. Sin embargo, en el caso de las reacciones gaseosas, la presión será un parámetro fundamental para controlar la concentración de reactivos y productos, y por lo tanto la velocidad de reacción.

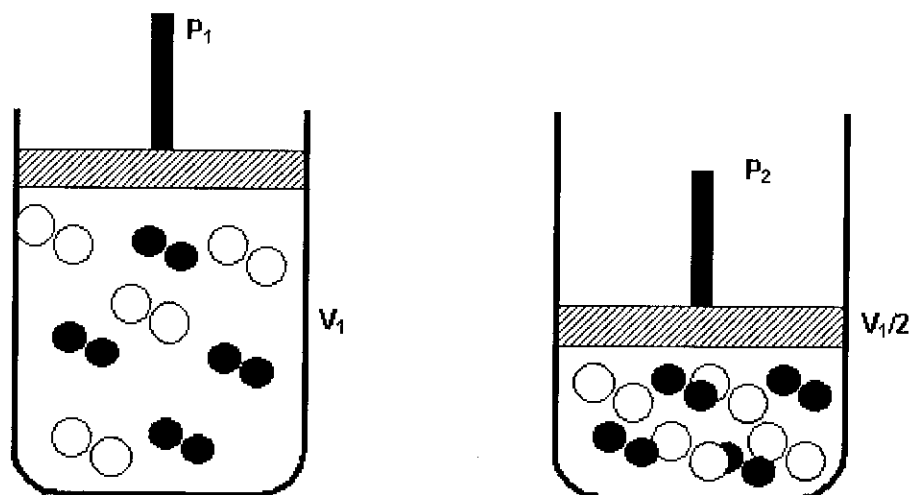


Figura No. 2. Efectos del aumento de presión en sistemas gaseosos

En la figura No.2 se observa, que aumentando la presión las moléculas de las sustancias reaccionantes se aproximan entre sí, acrecentando la posibilidad de choque entre sus moléculas, y por consiguiente se acelera la reacción.

f. Catalizadores: Se llaman catalizadores a las sustancias que intervienen en las reacciones, acelerándolas o retardándolas y que siguen presentes al finalizar la reacción, es decir que no se consumen en esta, no son parte de los productos obtenidos. Las sustancias que llevan a cabo el efecto contrario, es decir, que retardan la velocidad de reacción se denominan inhibidores.

Existen diferentes tipos de catalizadores, entre los que se encuentran:

i. Catalizadores de contacto o heterogéneos: Una reacción en la cual los reactantes y el catalizador no están en la misma fase (estado) es una reacción heterogénea. Este tipo de catalizadores generalmente producen una superficie donde las sustancias pueden reaccionar, y funcionan adsorbiendo alguno de los reactantes, debilitando el enlace en cuestión hasta el punto en que el otro reactante rompe dicho enlace. La adsorción es la adherencia de una sustancia a la superficie de otra.

En otras palabras, la adsorción provoca que las moléculas se encuentren muy cerca e incrementa el número de choques, de donde aumenta la velocidad de reacción.

Algunos metales (finamente divididos para aumentar la superficie de contacto) actúan como catalizadores de contacto, entre ellos se pueden mencionar: el platino, níquel, óxido férrico ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), pentóxido de vanadio ( $\text{V}_2\text{O}_5$ ), entre otros.

ii. Catalizadores de transporte u homogéneos: Estos catalizadores actúan interviniendo en la reacción y luego se regeneran al finalizar la misma. Un catalizador homogéneo se encuentra en la misma fase (estado) que los reactantes, lo cual ayuda a que no se tengan pérdidas de tiempo en el paso del catalítico a otra fase.

Es importante hacer notar que para el empleo de catalizadores, se cumple generalmente con algunas características comunes, que son:

- Gran desproporción entre la masa de las sustancias que reaccionan y la pequeña masa del catalizador.
- El catalizador se halla igual al final del proceso, que al comienzo de él.
- Un catalizador no produce una reacción que sin él no se realiza, solo modifica la velocidad de la misma.
- Los catalizadores son específicos de cada reacción o de un cierto grupo de reacciones.

La absorción de las impurezas que acompañan a las sustancias reaccionantes, pueden disminuir o detener la acción del catalizador. Estas sustancias que retardan la acción de los catalizadores se denominan venenos del catalizador.

En conclusión, para aumentar la velocidad de una reacción, se debe aumentar la posibilidad de choque entre las moléculas, iones o átomos de las sustancias reaccionantes, modificando las variables enumeradas que el proceso permita. Sin embargo, si el efecto buscado es el contrario, lo que debe hacerse es disminuir el número de choques posibles con las mismas variables mencionadas.

**2. Velocidad de reacción:** La velocidad de un suceso se define como el cambio que tiene lugar en un intervalo de tiempo. La cinética química busca establecer las velocidades de reacción en diferentes procesos que involucren transformaciones químicas; y establece que la velocidad de reacción depende de manera directa del tiempo y de los reactivos o productos de reacción. Es decir, que la velocidad de reacción se define como la masa o los moles consumidos de cierto reactivo o producidos de cierto producto en un período de tiempo determinado.

Entonces, las ecuaciones para la velocidad de reacción se encuentran dadas por:

$$Velocidad = \frac{\text{moles o masa que reaccionó}}{Vt} \quad (1)$$

$$Velocidad = \frac{\text{moles o masa que se produjo}}{Vt} \quad (2)$$

donde V es el volumen total de reacción y t es el tiempo de la misma.

En muchos casos, la velocidad de reacción (r) también puede expresarse en función de la concentración que se tenga de reactivos o productos, esto dado que las concentraciones se expresan en unidades de masa por volumen o moles por volumen. La ecuación de velocidad en función de la concentración se muestra a continuación:

$$r = \frac{C}{t} \quad (3)$$

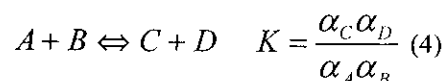
Donde C representa la concentración de reactivos o productos, r la velocidad de reacción y t el tiempo de reacción.

a. Naturaleza de los reactantes: La naturaleza de los reactantes involucrados en una reacción determina el tipo de reacción que se efectúa. Las reacciones en las cuales se redistribuyen enlaces o se transfieren electrones pueden ser más lentas que las que no involucran estos cambios. Las reacciones iónicas se efectúan inmediatamente, esto se debe a las frecuentes colisiones entre iones con cargas opuestas.

En una reacción iónica no hay transferencia de electrones. Las reacciones entre moléculas neutras pueden ser más lentas que las iónicas a causa de la transferencia electrónica y redistribución de enlaces. La mayor parte de las colisiones moleculares son elásticas, por lo tanto, las moléculas simplemente rebotan y se apartan sin cambios. Sin embargo, algunas colisiones tienen la suficiente energía para ocasionar cambios en las nubes electrónicas de las moléculas que chocan. Cuando ocurre el cambio, las moléculas que chocan pueden formar el complejo activado. La energía requerida para formar este complejo se conoce como energía de activación. Si esta es pequeña pocas de las colisiones tienen la suficiente energía para formar el complejo activado. Por lo tanto, la reacción puede ser tan lenta que no es detectable.

Por ejemplo, el hidrógeno y el oxígeno pueden mantenerse durante años en el mismo recipiente sin reaccionar. Aunque hay colisiones entre las moléculas, no se alcanza la energía de activación. Sin embargo, si la mezcla se calienta a 800 °C, o se introduce una llama o una chispa en el recipiente, el hidrógeno y el oxígeno reaccionan violentamente. El calor, la llama o la chispa suministran la energía de activación (Perry, 1997).

3. Estudio de las reacciones químicas: El estudio de una reacción química puede hacerse desde el punto de vista termodinámico o desde el cinético. El estudio termodinámico permite conocer la posición en la cual la reacción alcanzará el equilibrio. Cuantitativamente la posición de equilibrio viene definida por la constante de equilibrio, que representa el cociente de las actividades de productos y reaccionantes:

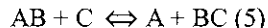


El valor de la constante es una indicación de la extensión en la que se producirá la reacción. Sin embargo, no da ninguna información relacionada con la duración del proceso. Los criterios termodinámicos no incluyen la variable tiempo, puesto que sólo consideran la diferencia de propiedades del sistema entre los estados inicial y final y, por lo tanto, no se ocupan de la velocidad a la que tiene lugar la reacción ni los estados intermedios por los que transcurre. Debido a esto, existen procesos termodinámicamente espontáneos que no se producen a velocidad apreciable o que lo hacen a velocidades muy pequeñas.

Para completar los conocimientos termodinámicos de los procesos químicos, la cinética química trata dos aspectos básicos: la descripción del mecanismo de reacción o conjunto de pasos y estados intermedios que se producen durante la reacción, y la formulación de una ley de velocidad que describa adecuadamente y en detalle la velocidad de la reacción.

a. Mecanismos de reacción: Desde el punto de vista termodinámico, en una reacción química, los reactivos constituyen el estado inicial y los productos el estado final. Al pasar del estado inicial al estado final, se produce un cambio de la energía libre. Cuando el cambio es negativo se dice que la reacción es espontánea y no existe ningún impedimento termodinámico para que la reacción se produzca, sin embargo, este enfoque sólo

tiene en cuenta las propiedades de reactivos y productos aislados, no incluye los posibles obstáculos que puedan existir durante la reacción. Entonces, considerando la siguiente reacción:



Puede observarse que la formación del nuevo enlace B-C requiere que las moléculas de los reactivos AB y C se acerquen a distancias lo suficientemente cortas para permitir un solapamiento eficaz de sus orbitales. Sin embargo, la disminución de la distancia comporta un aumento de la repulsión entre las nubes electrónicas. Para vencer la repulsión, las moléculas de los reactivos deben acercarse con suficiente energía cinética. Por encima de una determinada energía que permita el solapamiento eficaz, se empezarán a formar los nuevos enlaces de los productos, a la vez que se debilitarán los enlaces de los reactivos, formándose una especie integrada por todas las moléculas de reactivos y en la cual unos enlaces se están rompiendo mientras otros se están formando. Esta especie se conoce como complejo activado. Finalmente, se acabarán de romper los enlaces de los reactivos para conducir a la formación de los productos de la reacción. El proceso global se puede esquematizar en la forma:

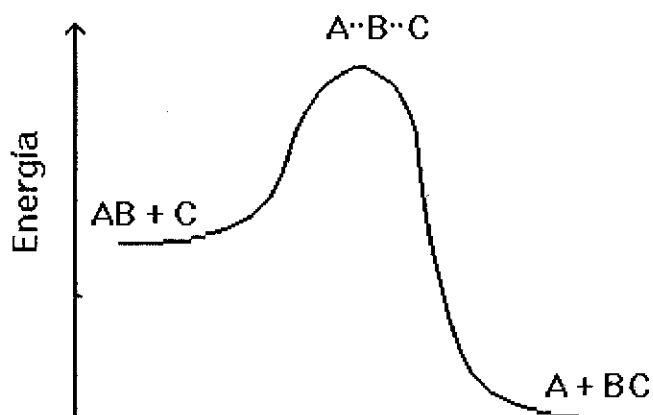
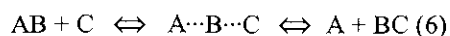


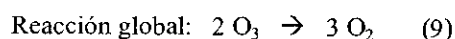
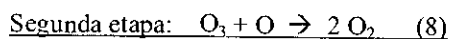
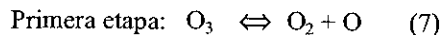
Figura No. 3. Diagrama de la energía de las diferentes especies que participan en una reacción

Puesto que para formar el complejo activado los reactivos deben vencer las fuerzas de repulsión, la energía del complejo activado es más alta que las energías de los reactivos y de los productos. La diferencia entre la energía de los reactivos y la del complejo activado se denomina energía de activación, y puede considerarse como una barrera energética que deben sobrepasar los reactivos para transformarse en productos.

La reacción anterior se produce con la formación de un solo complejo activado y superando una sola barrera de energía de activación. Este tipo de procesos se llama reacciones elementales. Una reacción puede transcurrir también mediante dos o más procesos elementales. En tal caso, puede decirse que la reacción es compleja.

El número de moléculas que toman parte como reactivos en un proceso elemental se denomina molecularidad. Se conocen reacciones elementales unimoleculares, bimoleculares y trimoleculares, aunque estas últimas son muy escasas.

La descomposición del ozono es un buen ejemplo de una reacción compleja, ya que posee una etapa unimolecular y dos etapas bimoleculares:



El conjunto de los procesos elementales de una reacción se denomina mecanismo de reacción.

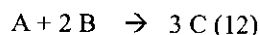
b. Ecuación de velocidad y orden de reacción: El grado en la cual ha progresado una reacción se conoce como grado de avance de la reacción (E); para reacciones a volumen constante, la conversión puede definirse como:

$$E(t) = \frac{C_i(t) - C_i^o}{n_i} \quad (10)$$

En esta expresión  $C_i(t)$  es la concentración del componente  $i$  que hay en el tiempo  $t$ ,  $C_i^o$  la inicial y  $n_i$  el coeficiente estequiométrico con su signo; el cual depende de la reacción, ya que es positivo para productos y negativo para reactivos. El grado de avance es independiente de la especie que se mida, por ello la velocidad de reacción se puede definir como la variación del grado de avance con el tiempo:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{n_i} \frac{dC_i(t)}{dt} \quad (11)$$

Es decir, que si se tiene la siguiente reacción:



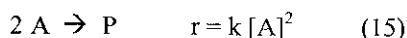
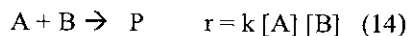
La velocidad de reacción se puede expresar como:

$$r = \frac{dE}{dt} = -\frac{dC_A}{dt} = -\frac{1}{2} \frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{3} \frac{dC_C}{dt} \quad (13)$$

El empleo de los coeficientes estequiométricos es necesario, ya que se debe unificar el concepto de velocidad de reacción, haciéndolo independiente de la especie química considerada. Además, esto asegura que la velocidad de reacción sea siempre positiva, tanto si se considera un reactivo como un producto.

La ecuación o expresión que relaciona la velocidad de reacción con las concentraciones de los compuestos que toman parte en ella, se denomina ley de velocidad o ecuación de velocidad. En el caso de un proceso elemental, la velocidad es proporcional al producto de las concentraciones de los reactivos elevadas a sus correspondientes coeficientes estequiométricos.

Algunos ejemplos claros de procesos elementales son:



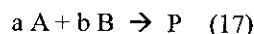
La constante de proporcionalidad  $k$  se conoce como constante de velocidad o cinética y se ve influida directamente por la temperatura de reacción.

Por lo general, para reacciones complejas, la ecuación de velocidad no es tan sencilla, y depende del mecanismo de reacción. De cualquier manera, para muchas reacciones la velocidad es proporcional a potencias de las concentraciones de los reactivos:

$$r = k [A]^n [B]^m \dots \quad (16)$$

Las potencias se denominan ordenes de reacción, dependen de cada uno de los reactivos. La suma de todos los ordenes de reacción,  $n + m + \dots$ , se denomina orden global de la reacción. En el caso especial de los procesos elementales los ordenes de reacción respecto a cada uno de los reactivos coinciden con los respectivos coeficientes estequiométricos y el orden global de la reacción coincide con su molecularidad.

c. Determinación experimental de la ecuación de velocidad: Al realizar el estudio cinético de una reacción, el primer objetivo es establecer la ecuación de velocidad. Lo cual supone la determinación de los ordenes de reacción y de la constante de velocidad. Así, si se estudia una reacción de la forma:



Generalmente se supone inicialmente una ley general del tipo:

$$r = k [A]^n [B]^m \quad (18)$$

Entonces, para determinar los ordenes de reacción se puede hacer uso del método de las velocidades iniciales, el cual se basa en la medida de la velocidad inicial ( $r_0$ ), para diversas mezclas de reacción, donde se mantienen constantes todas las concentraciones excepto una. En esas condiciones la velocidad aparece como una función de la única concentración variable  $y$ , por lo tanto, se puede determinar fácilmente el orden de reacción respecto a dicha especie. Así, en la reacción anterior, para determinar  $n$  se mantendría constante la concentración de  $B$  y se haría uso de la expresión:

$$r_0 = k' [A]_0^n \quad (19)$$

Donde  $k'$  incluye el término constante de concentración de  $B$ . Transformando por medio de logaritmos se obtiene:

$$\log r_0 = \log k' + n \log [A]_0 \quad (20)$$

Esta, en realidad, es la ecuación de una recta. Una serie de experiencias realizada para diversas concentraciones iniciales de  $A$ , permitirá obtener diversos puntos de la recta. El orden de reacción,  $n$ , es la pendiente de la recta, que puede obtenerse ajustando por mínimos cuadrados.

Experimentalmente, la determinación de la velocidad inicial se lleva a cabo tomando medidas de la concentración dentro de un intervalo de tiempo suficientemente pequeño al comienzo de la reacción. Así por ejemplo, si se toman una serie de medidas de la concentración de  $A$  a diferentes valores del tiempo  $t$ , desde el instante inicial donde  $t = 0$ , la velocidad inicial se puede calcular como:

$$r_0 = \frac{([A]_t - [A]_0) \frac{1}{a}}{t} \quad (21)$$

Las series de medidas de  $r_0$  permitirán calcular el orden de reacción respecto a  $A$ . Las medidas de la concentración del reactivo se toman haciendo uso de un método analítico suficientemente sensible, rápido y

selectivo. Usualmente se emplea un método basado en la medida de una propiedad física proporcional a la concentración de la especie de interés, tal como la absorbancia, o el potencial de un electrodo selectivo.

Una vez determinado el orden de la reacción respecto a una especie, se procede a determinar el orden respecto a otra y así sucesivamente. En el caso de reacciones complejas es necesario estudiar el orden de reacción respecto a las concentraciones de los productos, puesto que en numerosas ocasiones también están incluidos en la ley de velocidad. Cuando se conocen todos los ordenes se puede determinar la constante de velocidad de la forma:

$$k = \frac{r_0}{[A]_0^p [B]_0^m} \quad (22)$$

Alternativamente se puede ajustar la recta de la ecuación (20) y obtener  $k$  de la ordenada en el origen.

d. Integración de leyes de velocidad sencillas:

i. Reacciones de orden cero: En este caso la velocidad de formación del producto viene dada por una ecuación del tipo:

$$\frac{d[P]}{dt} = k \quad (23)$$

Cuya integración conduce a:

$$[P] = [P]_0 + k t \quad (24)$$

Esto a su vez muestra una variación lineal de la concentración con el tiempo. Reacciones de orden cero se encuentran frecuentemente en catálisis heterogénea, cuando la reacción se lleva a cabo sobre una superficie saturada de reactivo. Y en reacciones catalizadas con suficiente exceso de sustrato para saturar el catalizador.

ii. Reacciones de primer orden: Corresponden a procesos elementales unimoleculares:



Entonces, la ley de velocidad es del tipo:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A] \quad (26)$$

La integración de esta ecuación conduce a una expresión logarítmica:

$$\ln [A] = -k t + \ln [A]_0 \quad (27)$$

Representando  $\ln [A]$  frente al tiempo se obtiene una recta de pendiente igual a  $-k$  y con ordenada en el origen igual a  $\ln [A]_0$ . En procesos gobernados por leyes de primer orden la concentración de reactivo,  $A$ , disminuye exponencialmente y, de manera simultánea, la concentración de producto aumenta también exponencialmente:

$$[A] = [A]_0 e^{-kt} \quad (28)$$

$$[P] = [A]_0 (1 - e^{-kt}) \quad (29)$$

Otro concepto importante en cinética es el tiempo de vida media o período de semireacción. Se define como el tiempo necesario para que la concentración del reactivo se reduzca a la mitad. En el caso de una reacción de primer orden resulta:

$$[A]_0 / 2 = [A]_0 (1 - e^{-kt(1/2)}) \quad (30)$$

Y por tanto, la vida media viene dada por:

$$t_{1/2} = (\ln 2) / k \quad (31)$$

iii. Reacciones de segundo orden: Pueden darse dos casos, dependiendo de que la ecuación de velocidad sea función de la concentración de un solo reactivo o de dos. El primer caso corresponde a una reacción elemental del tipo:



que podrá describirse mediante la ecuación de velocidad de segundo orden siguiente:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^2 \quad (33)$$

La integración de esta ley de velocidad conduce a:

$$1/[A] = kt + 1/[A]_0 \quad (34)$$

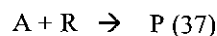
Y por lo tanto, la representación de  $1/[A]$  frente al tiempo da lugar a una recta de pendiente  $k$  y ordenada en el origen  $1/[A]_0$ . La concentración de  $A$  experimenta una variación hiperbólica con el tiempo:

$$[A] = \frac{[A]_0}{(1 + [A]_0 kt)} \quad (35)$$

El tiempo de vida media para este tipo de reacciones tiene la expresión:

$$t_{1/2} = 1 / ([A]_0 k) \quad (36)$$

El otro tipo de reacción de segundo orden viene representado por el proceso elemental:



que esta gobernado por la ecuación de velocidad:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][R] \quad (38)$$

Entonces, si llamamos  $x$  a la concentración de  $A$  que ha reaccionado en el tiempo  $t$ , la ley de velocidad integrada será:

$$\frac{1}{[R]_0 - [A]_0} \ln \left( \frac{[R]_0 ([A]_0 - x)}{[A]_0 ([R]_0 - x)} \right) = -kt \quad (39)$$

Un caso particular importante se encuentra cuando la concentración de uno de los reactivos es muy grande en comparación a la concentración del otro. En tal caso, la concentración del reactivo en exceso puede considerarse constante con el tiempo, por lo que la ley de velocidad quedará:

$$r = k' [A] \quad (40)$$

Es decir, la ecuación de velocidad se transforma en una ecuación de primer orden.

iv. Estudio de mecanismos complejos: El mecanismo complejo más sencillo es el formado por dos reacciones consecutivas de primer orden:



Las ecuaciones de velocidad para las especies A y B son:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A] \quad (42)$$

$$\frac{d[B]}{dt} = k_1[A] - k_2[B] \quad (43)$$

La primera reacción está gobernada por una ley de primer orden:

$$[A] = [A]_0 e^{-k_1 t} \quad (44)$$

Mientras la segunda reacción obedece a la ecuación diferencial siguiente:

$$\frac{d[B]}{dt} = k_1[A]_0 e^{-k_1 t} - k_2[B] \quad (45)$$

Esto indica que B se forma a medida que A se destruye y, al mismo tiempo, B se descompone siguiendo una reacción de primer orden. Si se considera que inicialmente  $[B]_0 = 0$  y  $[C]_0 = 0$ , la integración de la ecuación diferencial conduce a:

$$[B] = \frac{[A]_0 k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) \quad (46)$$

Pero como  $[C] = [A]_0 - [A] - [B]$ , resulta:

$$[C] = [A]_0 \left( 1 - \frac{k_2 e^{-k_1 t}}{k_2 - k_1} + \frac{k_1 e^{-k_2 t}}{k_2 - k_1} \right) \quad (47)$$

A partir de esta expresión se puede deducir que si  $k_1 \gg k_2$  entonces:

$$[C] = [A]_0 (1 - e^{-k_2 t}) \quad (48)$$

Igualmente, si  $k_2 \gg k_1$  resulta:

$$[C] = [A]_0 (1 - e^{-k_1 t}) \quad (49)$$

Podemos concluir que cuando uno de los procesos es claramente más lento que los otros se produce un efecto de cuello de botella, y la velocidad total de la reacción resulta controlada por este proceso. Esta etapa más lenta que controla la velocidad del proceso global, se llama etapa limitante de la velocidad.

Una situación de particular interés se encuentra cuando la especie intermedia B es muy reactiva ( $k_2 \gg k_1$ ). En este caso, su velocidad de destrucción igualará a la de formación, siendo su concentración muy pequeña y además, mientras la concentración de A se mantenga relativamente alta se podrá suponer que la concentración de B es constante con el tiempo. Cuando estos requisitos se cumplen se dice que se ha alcanzado el estado estacionario. En este momento se tiene:

$$\frac{d[B]}{dt} = k_1[A] - k_2[B] = 0 \quad (50)$$

de donde:

$$[B] = \frac{k_1}{k_2} [A] = \frac{k_1}{k_2} [A]_0 e^{-k_1 t} \quad (51)$$

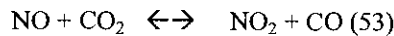
La concentración de C con el tiempo aumentará según la ley:

$$[C] = [A]_0 \left( 1 - \left( 1 + \frac{k_1}{k_2} \right) e^{-k_1 t} \right) \quad (52)$$

Lo cual coincide aproximadamente con la ecuación original no simplificada cuando se cumplen las dos condiciones necesarias para alcanzar el estado estacionario, esto es, que  $k_2 \gg k_1$  y que  $t \gg 1/k_2$ . La primera condición asegura la presencia de un proceso muy rápido en el cual el intermedio se destruya a medida que se forma, lo que mantiene su concentración constante. La segunda condición implica que se requiere un cierto tiempo durante el cual la concentración del intermedio aumenta desde cero hasta alcanzar la concentración estacionaria. Este tiempo se conoce como período de inducción.

Cuando se propone un mecanismo para una reacción compleja, hay que comprobar que las reacciones elementales se combinan para dar la reacción global. En algunos casos existen sustancias que no aparecen en la reacción global pero si participan en la reacción como especies intermedias.

e. Velocidad de reacción y constante de equilibrio: En el equilibrio, las concentraciones de reactivos y productos se mantienen constantes y, por tanto, sus derivadas respecto al tiempo serán cero. Por ejemplo, en el proceso elemental:



En el equilibrio la velocidad será:

$$r = k_d [\text{NO}]^c [\text{CO}_2]^e - k_i [\text{NO}_2]^e [\text{CO}]^e = 0 \quad (54)$$

y entonces:

$$k_d [\text{NO}]^c [\text{CO}_2]^e = k_i [\text{NO}_2]^e [\text{CO}]^e \quad (55)$$

Por lo tanto, en el estado de equilibrio las velocidades de las reacciones directa e inversa se igualan. Esto se conoce como principio del equilibrio detallado, o también como principio de reversibilidad microscópica. Este principio indica que en el equilibrio todos los procesos elementales están perfectamente balanceados con su reacción inversa, y que la velocidad del proceso directo iguala la velocidad del proceso inverso. El equilibrio es un estado dinámico, donde reactivos y productos se destruyen y forman con la misma velocidad.

De la ecuación anterior se puede obtener:

$$r = \frac{[\text{NO}_2]^e [\text{CO}]^e}{[\text{NO}]^c [\text{CO}_2]^e} = \frac{k_d}{k_i} \quad (56)$$

Lo cual indica que la constante de equilibrio es igual al cociente entre las constantes de velocidad de las reacciones directa e inversa (Hausbrand E. 1990).

## B. Diseño de reactores

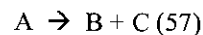
1. **Definición de reacción química:** Se conoce como reacción química aquella operación unitaria que tiene por objeto distribuir de forma distinta los átomos de ciertas moléculas (compuestos reaccionantes o reactantes) para formar otras nuevas (productos). El lugar físico donde se llevan a cabo las reacciones químicas se denomina reactor químico.

Es importante mencionar que existen varios factores que hay que tener en cuenta a la hora de llevar a cabo o desarrollar una reacción química; entre ellos se pueden enumerar:

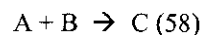
- Condiciones de presión, temperatura, y composición necesarias para que los materiales entren en estado de reacción.
- Las características termodinámicas y cinéticas de la reacción.
- Las fases (sólido, líquido, gaseoso) que se encuentran presentes en la reacción

Brevemente, puede mencionarse que las reacciones químicas son cambios que pueden ocurrir de diferentes maneras; estos cambios pueden clasificarse como se muestra a continuación:

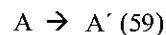
- **Descomposición**, consiste en que una molécula se divide en moléculas más pequeñas, átomos o radicales. Este tipo de cambios se ilustra con la siguiente ecuación:



- **Combinación**, ésta se realiza cuando una molécula o átomo se une con otra especie para formar un compuesto nuevo. Esto se ilustra por medio de la siguiente ecuación:



- **Isomerización**, en este caso la molécula no efectúa ninguna descomposición externa o adición a otra, es simplemente un cambio de configuración estructural interna. Esto se lleva a cabo de la siguiente manera:



donde A' es simplemente un isómero del compuesto o molécula A (Chemical Engineering Progress, 2000).

2. **Tipos de reacciones químicas:** Los tipos de transformaciones y reordenamientos de átomos y electrones pueden clasificarse en varias categorías, entre las que se pueden mencionar:

- **Reacciones Homogéneas:** Cuando se afecta solamente una fase, ya sea gaseosa, sólida, o líquida.
- **Reacciones Heterogéneas:** Cuando se requiere la presencia de al menos dos fases para que tenga lugar la reacción a una velocidad deseada.
- **Reacciones Enzimáticas:** Utilizan catalizadores biológicos (proteínas con alto peso molecular, con centros activos, y que trabajan a bajas temperaturas)
- **Reacciones Catalíticas:** Son aquellas reacciones que requieren de una sustancia adicional (que no aparece en el balance global) para modificar la velocidad de reacción; esta sustancia por su presencia acelera la reacción química, reacción que de otro modo ocurriría muy lentamente.
- **Reacciones No Catalíticas:** Los materiales reactantes no necesitan ninguna sustancia adicional para dar lugar a la reacción química

- Reacciones Autocatalíticas: En esta reacción, uno de los productos formados actúa como catalizador, participando en otra etapa del proceso, donde la velocidad de reacción es más grande que en la primera.
- Reacciones Endotérmicas: Son aquellas que adsorben calor del exterior.
- Reacciones Exotérmicas: Son aquellas que liberan calor hacia el exterior (Chemical Engineering Progress, 2000).

3. **Definición de reactor químico:** Un reactor químico es una unidad procesadora diseñada para que en su interior se lleve a cabo una o varias reacciones químicas. Dicha unidad procesadora esta constituida por un recipiente cerrado, el cual cuenta con líneas de entrada y salida para sustancias químicas, y está gobernado por un algoritmo de control.

Los reactores químicos tienen como funciones principales: Asegurar el tipo de contacto o modo de fluir de los reactantes en el interior del tanque, para conseguir una mezcla deseada con los materiales reactantes. Proporcionar el tiempo suficiente de contacto entre las sustancias y con el catalizador, para conseguir la extensión deseada de la reacción. Y permitir condiciones de presión, temperatura y composición de modo que la reacción tenga lugar en el grado y a la velocidad deseada, atendiendo a los aspectos termodinámicos y cinéticos de la reacción.

a. **Ecuación de rendimiento:** La ecuación de rendimiento es la expresión matemática que relaciona la salida con la entrada en un reactor químico, esto sin importar las diversas cinéticas y diferentes modelos de contacto.

Un modelo de contacto, se refiere a como los materiales circulan a través del reactor y se contactan unos con otros dentro de éste, además del tiempo que necesitan para mezclarse, y las condiciones y características de la incorporación de material.

Ahora bien, estos rendimientos generalmente se obtienen por medio de balances de masa y energía, cuyas ecuaciones base se muestran a continuación:

El balance de masas esta dado por la relación:

$$\text{ENTRA} - \text{SALE} + \text{GENERA} - \text{DESAPARECE} = \text{ACUMULA} \quad (60)$$

El balance de energía esta dado por la relación:

$$\text{ENTRA} - \text{SALE} \pm \text{GENERA} \pm \text{TRANSMITE} = \text{ACUMULA} \quad (61)$$

(Chemical Engineering Progress, 2000)

4. **Tipos de reactores:** Existen infinidad de tipos de reactores químicos, y cada uno responde a las necesidades de una situación en particular, entre los tipos más importantes, más conocidos, y mayormente utilizados en la industria se puede mencionar los siguientes:

- **Reactor discontinuo:** Es aquel en donde no entra ni sale material durante la reacción, sino más bien, al inicio del proceso se introducen los materiales, se lleva a las condiciones de presión y temperatura requeridas, y se deja reaccionar por un tiempo preestablecido, luego se descargan los productos de la reacción y los reactantes no convertidos. También es conocido como reactor por lotes.

- Reactor continuo: Mientras tiene lugar la reacción química al interior del reactor, éste se alimenta constantemente de material reactante, y también se retira ininterrumpidamente los productos de la reacción.
- Reactor semicontinuo: Es aquel en el cual inicialmente se carga de material todo el reactor, y a medida que tiene lugar la reacción, se va retirando productos y también incorporando más material de manera casi continua.
- Reactor tubular: En general es cualquier reactor de operación continua, con movimiento constante de uno o todos los reactivos en una dirección espacial seleccionada, y en el cual no se hace ningún intento por inducir al mezclado. Tienen forma de tubos, los reactivos entran por un extremo y salen por el otro.
- Tanque con agitación continua: Este reactor consiste en un tanque donde hay un flujo continuo de material reaccionante y desde el cual sale continuamente el material que ha reaccionado. La agitación del contenido es esencial, debido a que el flujo interior debe estar en constante circulación y así producir una mezcla uniforme.
- Reactor de lecho fluidizado: Se utiliza para reacciones donde intervengan un sólido y un fluido (generalmente un gas). En estos reactores la corriente de gas se hace pasar a través de las partículas sólidas, a una velocidad suficiente para suspenderlas, con el movimiento rápido de partículas se obtiene un alto grado de uniformidad en la temperatura evitando la formación de zonas calientes.
- Reactor de lecho fijo: Los reactores de lecho fijo consisten en uno o más tubos empacados con partículas de catalizador, que operan en posición vertical. Las partículas catalíticas pueden variar de tamaño y forma: granulares, cilíndricas, esféricas, etc. En algunos casos, especialmente con catalizadores metálicos como el platino, no se emplean partículas de metal, sino que éste se presenta en forma de mallas de alambre. El lecho está constituido por un conjunto de capas de este material. Estas mallas catalíticas se emplean en procesos comerciales como por ejemplo para la oxidación de amoníaco y para la oxidación del acetaldehídico a ácido acético.
- Fermentadores: Este tipo de reactores utilizan hongos, los cuales forman un cultivo, el cual a su vez se transforma en una sopa espesa que contiene crecimientos filamentosos. Un ejemplo se encuentra en la fabricación de antibióticos como la penicilina.

También se pueden mencionar los reactores isotérmicos, que son aquellos que trabajan u operan a una misma temperatura constante; los reactores isobáricos, que son aquellos que trabajan u operan a una misma presión constante; y los reactores adiabáticos, que son los que trabajan sin salidas o entradas de calor al sistema (Chemical Engineering Progress, 2000).

5. Ecuación general del balance de moles: El primer paso para llevar a cabo un balance de moles es definir las fronteras del sistema. Por lo tanto, el volumen del sistema es aquel que se encuentra encerrado por dichas fronteras. Un balance de moles de la especie  $j$  en un volumen del sistema, donde la especie  $j$  representa la especie química en la que se está interesado, se representa en la figura No. 4.

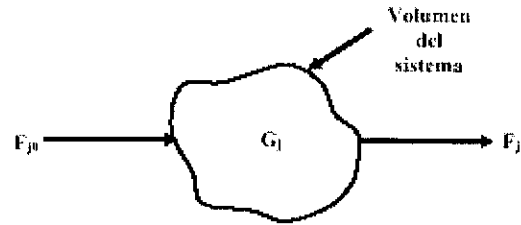


Figura No. 4. Balance en el volumen del sistema

Entonces, al hacer el balance de moles de la especie  $j$  en cualquier instante del tiempo  $t$ , se obtiene la siguiente ecuación:

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Velocidad de} \\ \text{flujo de } j \text{ hacia} \\ \text{el sistema} \\ \text{(moles / tiempo)} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{l} \text{Velocidad de} \\ \text{generación de } j \\ \text{por reacción} \\ \text{química dentro} \\ \text{del sistema} \\ \text{(moles / tiempo)} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{Velocidad de} \\ \text{flujo de } j \text{ desde} \\ \text{el sistema} \\ \text{(moles / tiempo)} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{Velocidad de} \\ \text{acumulación} \\ \text{de } j \text{ dentro} \\ \text{del sistema} \\ \text{(moles / tiempo)} \end{array} \right] \quad (62)$$

Lo cual a su vez se escribe como:

$$F_{j0} + G_j - F_j = \frac{dN_j}{dt} \quad (63)$$

Donde  $N_j$  representa el número de moles de la especie  $j$  en el sistema en el tiempo  $t$ . Si todas las variables del sistema (temperatura, concentración de las especies, presión) son uniformes espacialmente dentro de todo el volumen del sistema, la velocidad de generación de la especie  $j$ ,  $G_j$ , será sólo el producto del volumen de reacción,  $V$ , por la velocidad de formación de la especie  $j$ ,  $r_j$ . Es decir:

$$G_j = r_j V \quad (64)$$

Si la velocidad de formación de la especie  $j$  en la reacción varía con la posición en el volumen del sistema; es decir, que se tiene un valor de  $r_{j1}$  rodeado por un volumen  $\Delta V_1$ , dentro del cual la velocidad de reacción es uniforme; y también se tiene lo mismo en la posición 2, puede observarse que:

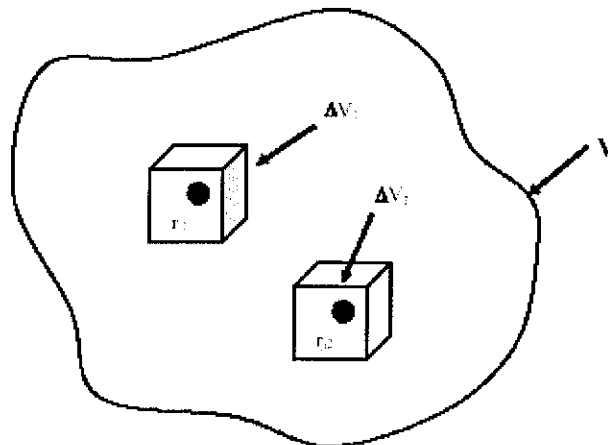


Figura No. 5. Volumen dividido del sistema de reacción

Debido a esta división de volúmenes que puede efectuarse dentro de un sistema en el que se lleva a cabo una reacción, los cuales poseen diferencias en cuanto a velocidad de reacción, la velocidad total de generación dentro del volumen total del sistema deberá de expresarse a partir de la suma de todas las velocidades de generación en cada uno de los subvolúmenes, este hecho se muestra en la siguiente ecuación:

$$G_j = \sum_{i=1}^M \Delta G_{ji} = \sum_{i=1}^M r_{ji} \Delta V_i \quad (65)$$

Si se toma el límite cuando M tiende a infinito y  $\Delta V$  tiende a 0, se puede pasar la expresión a términos integrales de la siguiente forma:

$$G_j = \oint_V r_j dV \quad (66)$$

Ahora bien, al saber que las propiedades de los materiales que reaccionan, como son concentración y temperatura, pueden variar en cada uno de los puntos del reactor, se dice que la velocidad de reacción es una función indirecta de la posición. Y sustituyendo la ecuación (66) en la (63), se obtiene:

$$F_{j0} - F_j + \oint_V r_j dV = \frac{dN_j}{dt} \quad (67)$$

Esta es la ecuación base del balance de moles, por medio de la cual se desarrollan las ecuaciones de diseño de cada uno de los diferentes tipos de ellos. El diseño generalmente emplea las ecuaciones mencionadas para determinar el volumen del reactor o el tiempo necesario para efectuar la reacción (Chemical Engineering Progress, 2000).

## 6. Ecuaciones de diseño de los diferentes tipos de reactores

a. Reactores por lotes: Este tipo de reactores no presenta flujos de entrada de reactivos ni de salida de productos, mientras que se efectúa la reacción. Dado esto, el balance general de moles de la especie j puede expresarse a partir de la ecuación (67) como:

$$\oint_V r_j dV = \frac{dN_j}{dt} \quad (68)$$

Ahora bien, en el caso de tener el reactor con un mezclado perfectamente homogéneo, o sea, sin variaciones en la velocidad de reacción en todo el volumen del reactor, la integración puede efectuarse de manera sencilla y la ecuación (68) se convierte en:

$$r_j V = \frac{dN_j}{dt} \quad (69)$$

Al diseñar este tipo de reactores, por lo general, se conoce la cantidad de producto que se desea obtener y la velocidad de reacción con que se obtiene, por lo que generalmente al resolver se obtiene el tiempo necesario para generar la producción buscada.

Todos los reactores por lotes muestran las siguientes características:

- Cada lote es un sistema cerrado.
- La masa total de cada lote es fija.

- El volumen o densidad de cada lote puede variar (conforme la reacción proceda).
- La energía de cada lote varía (conforme la reacción proceda).
- En la reacción el tiempo de residencia para todos los elementos del fluido es el mismo.
- La operación de cada reactor está inherentemente en estado inestable; por ejemplo, la composición cambia con respecto al tiempo.
- A pesar del estado inestable, se asume que cada lote es uniforme por una agitación eficiente.

b. Reactores de tanque con agitación continua (CSTR): Este tipo de reactor es de uso común en procesos industriales, también es conocido como CSTR (continuos stirred tank reactor) o reactor de retromezcla. Los CSTR generalmente se operan en estado estacionario y con una agitación excelente. Esto a la larga hace que se consideren nulas las variaciones de concentración, temperatura o velocidad de reacción en cualquier punto del recipiente. Sin embargo, si las consideraciones anteriores no fuesen válidas en algún sistema, lo más apropiado es recurrir a la técnica de distribución de tiempos de residencia para modelar el comportamiento.

Dado que el reactor opera en condiciones de estado estable, las variaciones en la concentración de la especie  $j$  se consideran nulas, y como también se estima constante la velocidad de reacción, la ecuación (67) se convierte en:

$$V = \frac{F_{j0} - F_j}{-r_j} \quad (70)$$

Esta ecuación proporciona el volumen de reactor requerido para reducir la velocidad de flujo de entrada de la especie  $j$ , a la velocidad de salida de la misma especie. Por su parte, la velocidad de flujo  $F_j$  es el producto de la concentración de la especie  $j$  y la velocidad de flujo volumétrica, esto se muestra en la siguiente ecuación:

$$F_j = C_j v \quad (71)$$

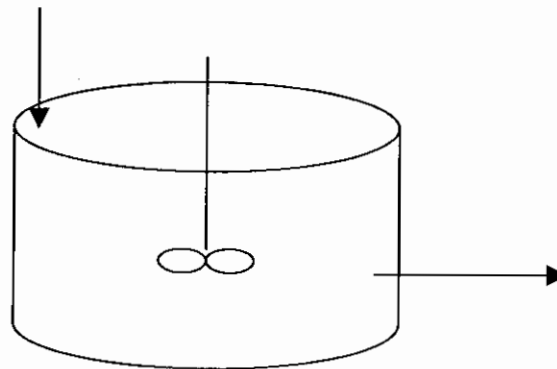


Figura No. 6. Esquema base de un CSTR

Este tipo de reactores se emplea generalmente en reacciones en fase líquida, en laboratorios y a escala industrial. En muchas ocasiones se prefiere su uso en arreglos en serie, como en el caso de la polimerización de estireno y butadieno para la fabricación de goma sintética.

Los reactores tipo CSTR presentan las siguientes características:

- El flujo a través del recipiente, las corrientes de entrada y salida, son continuos, pero no necesariamente a velocidad constante.
- El sistema de masa entrando al recipiente no es necesariamente fijo.
- El fluido entrando al recipiente es perfectamente mezclado y por lo tanto sus propiedades son uniformes en cualquier tiempo, esto se debe a su agitación eficiente.
- La densidad del fluido no es necesariamente constante, esto es, la densidad de la corriente de salida puede discernir a la corriente de entrada.
- El sistema puede operar en estado estable o en estado inestable.
- Un intercambiador de calor puede proveer al reactor de un control de temperatura.

c. Reactores tubulares: Este reactor generalmente consiste de tubo cilíndrico operado en estado estacionario, parecido a un CSTR. En estos reactores, no existe mezcla en la dirección del flujo, pero existe una mezcla completa en la dirección perpendicular al flujo (dirección radial). Esto se observa en la siguiente figura:

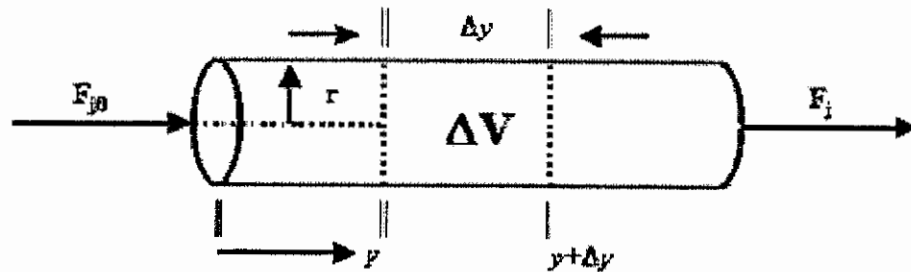


Figura No. 7. Esquema base de un PFR

La concentración varía a lo largo de la coordenada  $y$ , pero no en la coordenada radial  $r$ . Cuando la reacción se realiza en condiciones isotérmicas, la temperatura tampoco varía con la coordenada  $y$ . Por lo tanto, la única variable que afectará la conversión será la longitud del reactor.

Para obtener esta ecuación de diseño, es necesario dividir un reactor en varios subvolúmenes de tal forma que en cada subvolumen  $\Delta V$ , la velocidad de reacción pueda considerarse espacialmente uniforme. Entonces, como no existen variaciones espaciales de la velocidad de reacción, y dado que  $F$  es función de la posición en  $y$ , la ecuación (67) se convierte en:

$$F_j(y) - F_j(y + \Delta y) + r_j \Delta V = 0 \quad (72)$$

Ahora bien, el volumen diferencial es producto del área transversal, que en un reactor tubular permanece constante y de la longitud. De manera que la ecuación (72), también puede escribirse como:

$$-\left[ \frac{F_j(y + \Delta y) - F_j(y)}{\Delta y} \right] = -Ar_j \quad (73)$$

De este modo, cuando el límite del cambio en  $y$  tiende a 0, el término de la izquierda de la ecuación anterior genera una derivada, que produce la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{dF_j}{dy} = Ar_j \quad (74)$$

que en términos del volumen se puede representar como:

$$\frac{dF_j}{dV} = r_j \quad (75)$$

A partir de esta ecuación, puede resaltarse que si el área de la sección transversal del reactor cambia, la ecuación de diseño no se altera. Es decir, que el grado de reacción que se alcanza en un reactor de flujo de tapón (PFR) o reactor tubular no depende de su forma, sino que solamente de su volumen.

También es importante mencionar que mientras en un reactor de tanque los componentes de la mezcla estarían lo mejor mezclados posible, en un reactor tubular la mezcla sería la mínima. Entonces, un reactor tubular es un conducto a través del cual los reactantes fluyen y en el que no se pretende incrementar el grado natural de la mezcla.

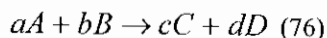
Un problema común en este tipo de reactores es el control de la temperatura, la cual debe llevarse a cabo a través de la pared, y por consiguiente, aparecen problemas de transmisión de calor. También debe enfocarse en las posibles variaciones de la velocidad de flujo a lo largo del tubo, es decir, que en un flujo laminar, el fluido que se localiza en el centro se mueve a una velocidad dos veces la velocidad promedio, mientras que en un flujo turbulento, la velocidad media es más uniforme a través del tubo.

Este tipo de reactores se emplea tanto para la fase líquida como para la gaseosa; y tienen similitud con los CSTR porque ambos son de flujo continuo, pero se diferencian en sus características de mezclado. Las características de los PFR son (Chemical Engineering Progress, 2000):

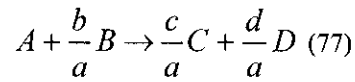
- El flujo a través de la tubería, tanto la corriente de entrada como la de salida, es continua, pero no necesariamente lleva una velocidad constante.
- El sistema de masa dentro de la tubería no necesariamente es fija.
- Si hay mezclado radial del flujo dentro del tubo.
- Hay un mezclado axial completo del flujo incidente al tubo; entonces, las propiedades del fluido, incluyendo su velocidad, son uniformes en este plano.
- El sistema puede operar a estado estable o inestable.
- Puede haber transferencia de calor a través de las paredes del tubo entre el sistema y sus alrededores.

## 7. Conversión y tamaño del reactor

a. Definición de conversión: Para la definición de conversión, se usa uno de los reactantes como base de los cálculos y de allí se podrá hacer referencia a otras especies. De hecho, la forma correcta es usar el reactivo limitante como la base de los cálculos. Entonces, puede considerarse la reacción general:



Donde las letras mayúsculas representan las especies químicas y las minúsculas los coeficientes estequiométricos. Ahora bien, si se toma como base al reactivo A, deben de dividirse todos los coeficientes dentro del coeficiente estequiométrico de A:



La forma de poner el número de moles de cada una de las especies de la reacción es mediante una variable llamada conversión ( $X_A$ ), la cual se define como el número de moles de A que han reaccionado por mol de A alimentado al reactor.

$$X_A = \frac{\text{moles de A reaccionados}}{\text{moles de A alimentados}} \quad (78)$$

b. Ecuación de diseño en sistemas por lotes: En casi todos los reactores por lotes, cuanto más tiempo permanezca un reactivo en el reactor, más de él se convierte en productos hasta que se llegue al equilibrio o bien se agote el reactivo (la conversión X es función del tiempo que los reactivos se mantengan en el reactor). Ahora bien, el número de moles que se acumule en el reactor, también es función de la conversión, por lo que la ecuación base mostrada para el diseño de reactores por lotes, se convierte en:

$$\frac{dN_A}{dt} = \frac{d[N_{A0}(1 - X_A)]}{dt} = -N_{A0} \frac{dX_A}{dt} = (-r_A)V \quad (79)$$

Y resolviendo la ecuación diferencial, se obtiene que:

$$t = N_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)V} \quad (80)$$

Esta ecuación proporciona el tiempo necesario para alcanzar un conversión dada, en condiciones de operación isotérmicas o no isotérmica; el volumen del fluido y la velocidad de reacción quedan bajo el signo integral, porque, generalmente, varían durante el transcurso de la reacción.

Si la densidad del fluido permanece constante, esta ecuación puede simplificarse:

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{-r_A} \quad (81)$$

c. Tiempo espacial y velocidad espacial: Del mismo modo que el tiempo t de reacción es la medida natural de la velocidad del proceso, el tiempo espacial y la velocidad espacial son las medidas adecuadas para el diseño de los reactores de flujo. Estos términos se definen de la siguiente manera:

Tiempo espacial

$$\tau = \frac{t}{s} = \left( \begin{array}{l} \text{Tiempo necesario para tratar un} \\ \text{volumen de alimentación igual} \\ \text{al volumen del reactor, medido} \\ \text{en condiciones determinadas} \end{array} \right) = (\text{tiempo}) \quad (82)$$

Velocidad espacial

$$s = \frac{1}{\tau} = \left( \begin{array}{l} \text{Número de volúmenes de la alimentación} \\ \text{en condiciones determinadas que} \\ \text{puede tratarse en la unidad de tiempo} \\ \text{medidos en volúmenes de reactor} \end{array} \right) = (\text{tiempo}^{-1}) \quad (83)$$

Es decir, que una velocidad espacial de  $n \text{ h}^{-1}$ , significa que el volumen de alimentación que se trata en el reactor cada hora es igual a  $n$  veces el volumen del reactor.

Además, es evidente que el valor de la velocidad espacial o del tiempo espacial, dependen de las condiciones elegidas; si son las de la corriente que entra al reactor, la relación entre velocidad y tiempo y las otras variables es:

$$\tau = \frac{1}{s} = \frac{C_{A0}V}{F_{A0}} = \frac{V}{v_0} \quad (84)$$

d. Ecuación de diseño para los reactores tipo CSTR: Se sabe que la entrada de moles a un reactor de tanque agitado define por medio de la conversión, la salida de moles de un determinado reactivo. Es decir, que considerando los flujos de moles a la entrada, puede escribirse los flujos de salida como sigue:

$$F_A = F_{A0} (1 - X_A) \quad (85)$$

Entonces, sustituyendo en la ecuación (67), puede obtenerse:

$$F_{A0} X_A = (-r_A) V \quad (86)$$

Y aplicando la definición de tiempo espacial, se obtiene:

$$\tau = \frac{1}{s} = \frac{V}{v_0} = \frac{VC_{A0}}{F_{A0}} = \frac{C_{A0}X_A}{-r_A} \quad (87)$$

Para el caso de sistemas de densidad constante  $X_A = 1 - C_A/C_{A0}$ , la ecuación de diseño de reactores de mezcla puede escribirse también en función de las concentraciones:

$$\tau = \frac{V}{v} = \frac{C_{A0}X_A}{-r_A} = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A} \quad (88)$$

e. Ecuación de diseño para el reactor tubular: Empleando la ecuación (67) y combinándola con la (85), puede obtenerse una expresión diferencial que relaciona la conversión de una especie con la velocidad de reacción, la cual se muestra a continuación:

$$F_{A0} \frac{dX_A}{dV} = -r_A \quad (89)$$

Separando las variables e integrando con límites  $V=0$  cuando  $X_A=0$  para obtener el volumen del reactor de flujo de tapón necesario para lograr una conversión dada  $X_A$ :

$$V = F_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (90)$$

Para el caso de densidad constante:

$$X_A = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} \quad \text{y} \quad dX_A = -\frac{dC_A}{C_{A0}} \quad (91)$$

Y por lo tanto, colocando la ecuación de diseño en función de las concentraciones:

$$\tau = \frac{V}{v_0} = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{-r_A} \quad (92)$$

(Chemical Engineering Progress, 2000).

8. Diseño para reactores simples: El diseño de un reactor para la obtención de un producto determinado no es una cuestión que dependa únicamente de la reacción, ya que para un mismo proceso pueden proponerse varios diseños.

La ecuación cinética que describe el comportamiento de un reactante  $f$  es una magnitud intensiva y nos indica la rapidez con que se forma o desaparece el componente  $j$  dentro de un entorno a ciertas condiciones, lo que se expresa a través de la siguiente ecuación:

$$r_j = \frac{1}{V} \left( \frac{dN_j}{dt} \right)_{\text{reacción}} = f \quad (93)$$

Entonces, para poder diseñar un reactor se tiene que conocer el tamaño y el tipo del mismo, así como las condiciones de operación más adecuadas para el fin propuesto. Como las condiciones en el reactor pueden variar con la posición y el tiempo, es imprescindible realizar la integración adecuada de la expresión cinética diferencial para las condiciones de operación. Dicha integración puede presentar problemas, los cuales se atribuyen a la variación de temperatura y composición del fluido reactante en diferentes puntos del reactor, dependiendo del carácter exotérmico o endotérmico de la reacción y de la velocidad de intercambio de calor con su medio ambiente.

Por otra parte, las características geométricas del reactor determinan la trayectoria del fluido a través del mismo, y fijan las condiciones de mezclado que contribuyen a diluir la alimentación y redistribuir la materia y el calor.

a Consideraciones para diseño: Los factores que deben considerarse dentro del reactor químico para lograr exitosamente la reacción deseada son:

- Consideraciones en las que la reacción es posible.
- En qué grado se produce la reacción (Termodinámica).
- La velocidad de reacción (cinética).
- Las fases presentes en la reacción.

Ahora bien, también debe comprenderse la función que cumplen los reactores, las cuales son:

- Asegurar el tipo de contacto o el flujo de los reactantes en el interior del aparato, para conseguir la mezcla deseada en las fases presentes.
- Proporcionar el tiempo de contacto entre las sustancias y el catalizador, con la finalidad de conseguir la extensión deseada para la reacción.

- Ajustar las condiciones de operación, tales como la presión, temperatura y composición, de modo que la reacción tenga lugar en el grado y velocidad deseada.

En lo que se refiere a la parte experimental, deben de cuantificarse una serie de variables de proceso, tales como:

- Flujos
- Temperaturas (necesaria para superar por ejemplo la energía de activación de reacción).
- Presión de operación

Con toda esta información se procederá a decidir las dimensiones del equipo, los materiales de construcción, las necesidades de calefacción, refrigeración, compresión, etc. Todo esto se calcula por medio de leyes básicas y ecuaciones que relacionan variables del sistema.

Sin embargo, también son necesarios antes de la decisión final: un análisis de costos, instrumentación y métodos de control, y condiciones de mercado (precios de reactantes y productos).

b. Diseño de un CSTR: El primer paso es conocer la ecuación de diseño del reactor, que se mostró anteriormente (86). Si la velocidad de flujo volumétrico no cambia con el transcurso de la reacción y empleando la definición de tiempo espacial, se obtiene:

$$\tau = \frac{V}{v_0} = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A} \quad (94)$$

Entonces, el siguiente paso es el empleo de la cinética de reacción, que si se considera de primer orden, de la forma  $-r_A = kC_A$ , produce la siguiente ecuación:

$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{kC_A} \quad (95)$$

Entonces, si se desprecia el cambio de volumen durante la reacción, y despejando la concentración en función de la conversión, se obtiene:

$$X = \frac{\tau k}{1 + \tau k} \quad (96)$$

En caso de que la reacción sea de primer orden, el producto del tiempo por la constante cinética se conoce como número de Damköler. Esta cantidad adimensional nos permite darnos una idea del grado de conversión que se puede alcanzar en reacciones de flujo continuo. Si las reacciones son irreversibles y de primer orden o segundo orden, los números de Damköler son respectivamente:

$$Da = \frac{-r_{A0}V}{F_{A0}} = \frac{kC_{A0}V}{v_0C_{A0}} = \tau k \quad \text{y} \quad Da = \frac{kC_{A0}^2V}{v_0C_{A0}} = \tau kC_{A0} \quad (97)$$

En caso de que la reacción sea de segundo orden en fase líquida, la combinación de la ley de velocidad y de diseño, proporciona:

$$V = \frac{F_{A0}X}{kC_{A0}^2(1-X)^2} \quad (98)$$

Ahora bien, empleando las definiciones de conversión y de tiempo de residencia, puede obtenerse la siguiente ecuación:

$$\tau = \frac{X}{kC_{r0}(1-X)^2} \quad (99)$$

Y despejando la conversión se obtiene:

$$X = \frac{(1+2Da) - \sqrt{1+4Da}}{2Da} \quad (100)$$

(Chemical Engineering Progress, 2000).

## C. Principios de Termodinámica

1. Capacidad calorífica: El calor es visto a menudo en relación con el efecto que tiene sobre el objeto hacia o desde el cual se transfiere. Lo anterior constituye el origen de la idea de que un cuerpo tiene una capacidad para el calor. Entre más pequeño sea el cambio de temperatura provocado en un objeto por una transferencia de calor dada, mayor es su capacidad calorífica. Esta última, queda definida por la siguiente ecuación:

$$C = \frac{dQ}{dt} \quad (101)$$

La dificultad con esta expresión es que hace que C, al igual que Q, sea una cantidad que dependa del proceso más que una función de estado. Sin embargo, lo anterior sugiere la posibilidad de definir más de una capacidad calorífica útil.

Para fluidos homogéneos se emplean comúnmente dos tipos de capacidades caloríficas, las cuales son funciones de estado, definidas por otras funciones de estado. Estas capacidades quedan definidas por medio de las siguientes ecuaciones:

Capacidad calorífica a volumen constante

$$C_v = \left( \frac{\partial U}{\partial t} \right)_v \quad (101)$$

Capacidad calorífica a presión constante

$$C_p = \left( \frac{\partial H}{\partial t} \right)_p \quad (102)$$

Estas definiciones engloban tanto a capacidades caloríficas específicas como molares, lo que en realidad depende del hecho de que U y H sean propiedades específicas o molares. El que sean molares, significa esencialmente que el valor de dichas propiedades se encuentra en dependencia del número de moles que se tenga del compuesto dado, mientras que la especificidad denota la relación con la masa del compuesto.

Las ecuaciones (101) y (102) en realidad no están referidas a un proceso dado, sin embargo, si son empleadas para los procesos específicos, que son el isocórico o isométrico (a volumen constante) y el isobárico (presión constante).

Para un proceso a presión constante, la ecuación (102) puede escribirse como:

$$dH = C_p dT \quad (103)$$

E integrando se obtiene:

$$\Delta H = \int_{T_1}^{T_2} C_p dT \quad (104)$$

Ahora bien, para un proceso a presión constante y mecánicamente reversible, el resultado anterior, puede escribirse como:

$$Q = n\Delta H = n \int_{T_1}^{T_2} C_p dT \quad (105)$$

Como todas las variables involucradas en la ecuación anterior son propiedades específicas, no importa en realidad que la presión no permanezca constante en todo el proceso, simplemente es suficiente que la presión final e inicial sean iguales, para que el uso de la ecuación sea válido.

Ahora bien, cabe mencionar que, a pesar de que esta expresión simplifica el cálculo de la entalpía de los procesos, en muchos casos evaluar el término integral no es simple. Como primera aproximación, y bajo condiciones donde el cambio de temperatura es considerablemente reducido, suele considerarse a la capacidad calorífica como una constante independiente de la temperatura. Al considerar esto, la ecuación (105) se convierte en:

$$\Delta H = C_p \Delta T \quad (106)$$

A pesar de esto, en muchos casos, el cambio de temperatura no es pequeño, y el considerar la capacidad calorífica como un término independiente de la temperatura suele generar errores considerables en los cálculos. Debido a esto, se han desarrollado expresiones diversas que relacionan la capacidad calorífica de los compuestos con la temperatura, y que generalmente son válidas únicamente en un rango dado de temperaturas y condiciones de operación. Entre estas relaciones se encuentran las lineales, cuadráticas, cúbicas, potenciales, etc. Sin embargo, entre las más empleadas, se encuentran las definidas por la siguiente ecuación:

$$\frac{C_p}{R} = A + BT + CT^2 + DT^{-2} \quad (107)$$

Esta suele emplearse para gases que pueden considerarse como ideales, y las constantes A, B, C y D pueden encontrarse fácilmente en la literatura. Para sustancias no gaseosas, suele hacerse relaciones parecidas, que en muchos casos cambian los exponentes a los que se encuentra elevada la temperatura, pero cuyas constantes también pueden encontrarse fácilmente en la literatura (Smith, 2000).

2. Calor estándar de reacción: Las reacciones químicas se acompañan generalmente por una transferencia de calor o por cambio de temperatura durante el transcurso de la reacción. Estos efectos son manifestaciones de las diferencias en la estructura molecular, y por lo tanto, de energía de los productos y reactivos. Es decir, que si se considera una reacción cuyos productos tienen un nivel energético menor que el de los reactivos, la energía diferencial entre los dos estados, debe de reflejarse ya sea en un cambio de la

temperatura de los productos o en una transferencia de calor hacia el medio, por cualquiera de los tres mecanismos de transferencia (conducción, convección o radiación).

Cada una de la gran cantidad de reacciones químicas posibles, puede realizarse de diferentes maneras, y cada una de estas formas de reaccionar irá acompañada de un efecto calorífico específico. Por esto, lo que se hace es cuantificar datos para reacciones a condiciones estándar de reacción, que luego pueden ajustarse a las condiciones de operación de cada proceso empleado.

La cantidad de calor requerido por una reacción específica depende de las temperaturas de los reactivos y productos. Por lo que se obtiene una base aceptable para el estudio de los efectos caloríficos de una reacción, cuando los productos de la reacción y los reactivos empleados en la misma, se encuentran todos a la misma temperatura.

Suele utilizarse al calor de reacción como el cambio de la entalpía entre los dos estados de reacción, que a la larga traen consigo un calor que debe de extraerse del medio o que debe de desecharse al mismo. Entonces, si se considera la siguiente reacción:



Puede definirse al calor estándar de reacción como el cambio de la entalpía cuando  $a$  moles de  $A$  y  $b$  moles de  $B$  en sus estados estándares a temperatura  $T$  reaccionan para formar  $l$  moles de  $L$  y  $m$  moles de  $M$  en sus estados estándares a temperatura  $T$ . El estado estándar es un estado particular de una especie, a una temperatura dada, con una presión, composición y estado físico conocidos.

Debe notarse que los calores estándar de reacción dependen casi exclusivamente de dos factores, que son la temperatura y la cantidad de moles reaccionandos. Es decir, que como las demás condiciones suelen considerarse estándar, no pueden variarse a excepción de la temperatura. Mientras que los moles son importantes, dado que las entalpías o calores estándar de reacción generalmente están dados sobre la base de una reacción, con lo que si se multiplican los reactivos al doble de moles, también el calor de reacción debe multiplicarse por dos.

a. Calor estándar de formación: La tabulación de los calores estándar de reacción para todas las reacciones posibles, es un procedimiento poco práctico. Sin embargo, el calor estándar de cualquier reacción puede conocerse fácilmente si se conocen los calores estándar de formación de cada una de las especies involucradas en la reacción.

Una reacción de formación se define como aquella donde se forma un solo compuesto a partir sus elementos constituyentes; mientras que el calor estándar de formación es el calor de la reacción de formación a condiciones estándar de operación. Los calores estándar de formación son útiles, debido a que los compuestos en su estado elemental se definen como estado de referencia.

Muchos de los datos de los calores estándar de formación suelen mostrarse tabulados en la literatura, tal y como se muestra en la Tabla No.1.

Componente químico		Estado	Calor de formación
Metano	CH <sub>4</sub>	g	-74.520
Etano	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	g	-83.820
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	g	104.680
n-Butano	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	g	-125.790
n-Pentano	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	g	-146.760
n-Hexano	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	g	-166.920
n-Heptano	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	g	-187.780
n-Octano	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	g	-208.750
Etileno	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	g	52.510
Propileno	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	g	19.710
1-Buteno	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	g	-540
1-Penteno	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>	g	-21.280
1-Hexeno	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	g	-41.950
1-Hepteno	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>	g	-62.760
Acetaldeído	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	g	-166.190
Ácido Acético	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	l	-484.500
Acetileno	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	g	227.480
Benceno	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	g	82.930
Benceno	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	l	49.080

Tabla No. 1: Calores estándar de formación de algunas sustancias

b. Calor estándar de formación de enlace: A pesar de las ventajas que representan los calores estándar de formación, estos no han sido evaluados para todos los compuestos existentes, de donde surge la necesidad de poderlos estimar por algún otro medio. Uno de los medios empleados son los denominados calores estándar de enlace, que se definen como el calor necesario para romper un enlace dado. Estos calores de formación de enlace suelen encontrarse en la literatura de la misma manera que los calores estándar de formación, y permiten el cálculo de estos últimos, en el caso de compuestos poco comunes.

c. La ley de Hess: Hess (1802-1850) observó que el calor que interviene en una reacción química es independiente de la forma en que ésta se realice. La ley de Hess postula por lo tanto, que los calores de reacción son aditivos; siempre y cuando las reacciones se realicen en las mismas condiciones de presión y temperatura.

La ley de Hess puede aplicarse al cálculo mediante ciclos termodinámicos de entalpías de procesos ficticios o de procesos no realizables en el laboratorio. Sin embargo, debe de tomarse muy en cuenta la restricción de que no debe de variarse la presión y temperatura de las reacciones, ya que de lo contrario, el resultado final será la suma de varios calores, que no reflejarán el calor buscado, por la adición de varias reacciones, en la consecución de una reacción dada (Smith, 2000).

## D. Proceso de producción de detergentes en polvo

En sociedades antiguas e incluso hoy en día, las personas limpiaban su ropa al mojarla y enjuagarla en las rocas cercanas a las corrientes de agua. Esta es una buena práctica, ya que permite que por medio de la agitación mecánica la remoción de materiales que el agua es capaz de disolver. Sin embargo, las sustancias oleosas son difíciles de remover de esta manera, dado que las grasas no suelen ser solubles en agua pura y permanecen ligadas a la ropa. En la antigüedad, el problema era solucionado por medio de sustancias jabonosas extraídas de hojas, semillas y frutos.

Cerca del año 2800 a.C. en Babilonia, fue donde se empezó a fabricar jabón por el hombre; lo cual se efectuaba por medio de la mezcla en caliente de grasas y bases. Y fue en el siglo XV cuando se empezó a hacer con soluciones acuosas de hidróxido de sodio, en Venecia. Luego de esto, los jabones pasaron a ser parte considerable de la industria, desarrollándose varias presentaciones y orígenes para los procesos productivos.

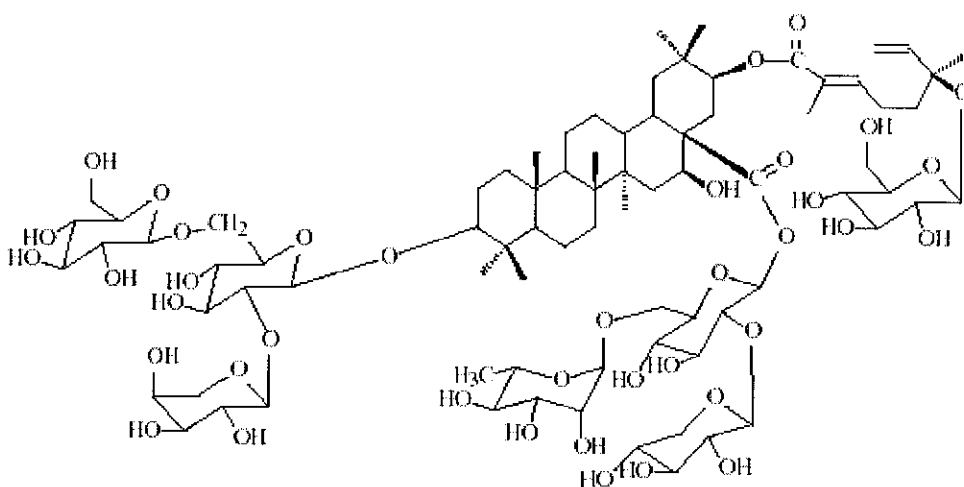


Figura No. 8. Estructura química del saponin de la *Acacia auriculiformis* (jabón natural)

Claro que habiendo fuentes naturales de fabricación de jabones, la pregunta sería por qué se reemplazaron con detergentes sintéticos derivados de la petroquímica. En este caso hay dos factores principales a considerar:

- Los alquilcarboxilatos son insolubles en agua dura debido a las redes formadas con calcio y magnesio; debido a esto, el desempeño de lavado se ve menguado por las precipitaciones, que provocan mal olor y deterioro de las superficies a lavar.
- El precio también es importante, dado que con el auge de la industria del petróleo, los subproducto como el propileno pueden hacerse reaccionar con ácido sulfúrico y benceno, para formar ácidos sulfónicos, de precio más bajo que las grasas y aceites naturales.

Entonces, en la actualidad se prefiere el uso de componentes sintéticos como el denominado ABS o alquil bencen sulfonato, que es un producto altamente utilizado como limpiador, y que tiene un comportamiento aceptable frente al agua dura y de costo moderado. La síntesis de este compuesto puede mostrarse esquemáticamente de la siguiente manera (Stadros, 1984):

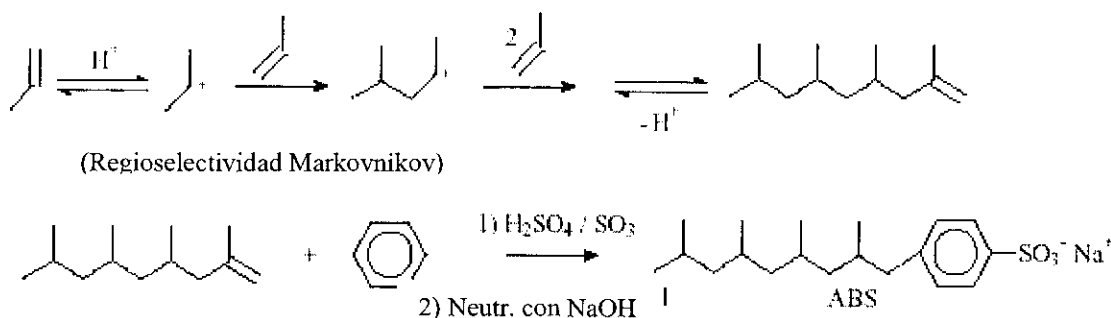


Figura No. 9. Síntesis de ABS

1. **Definición de un detergente:** Un detergente es un producto que se utiliza con el fin de remover la suciedad de prendas sucias, dispersándola en agua, para que se las lleve. Las sustancias hidrofílicas no necesitarían de estos componentes, dado que por acción mecánica y su afinidad al agua, ésta misma remueve la suciedad. Sin embargo, éste no es el caso de las sustancias hidrofóbicas, que deben de tratarse con algún tipo de detergente para que sean solubles en agua (Stadros, 1984).

El proceso de solubilización en agua se lleva cabo por medio de la formación de micelas, las cuales son compuestos de gran tamaño, donde las partículas de jabón o detergente, por su dualidad de tener una parte hidrofílica y una hidrofóbica, se pegan al compuesto hidrofóbico, dejando en la parte más externa una serie de cabezas hidrofílicas, que hacen que el compuesto tenga afinidad por el agua, y ésta pueda arrastrarlo fácilmente (Stadros, 1984).

Los detergentes difieren de los jabones por su modo de actuar con las aguas duras. Los jabones forman compuestos insolubles con los iones de magnesio y de calcio presentes en el agua dura; estos compuestos insolubles se precipitan y reducen las acciones espumante y limpiadora. Los detergentes pueden reaccionar con los iones de agua dura, pero los productos resultantes son solubles o permanecen dispersos en forma coloidal en el agua. Estas características se debe principalmente a sus componentes de fabricación (Stadros, 1984).

Los detergentes se han dividido en cuatro grupos principales: aniónicos, catiónico, no aniónicos y anfotéricos. El mayor grupo lo forman los aniónicos que normalmente son las sales de sodio de un sulfato o sulfonato orgánico. Los detergentes se pueden formular de modo que se obtenga un producto con las características deseadas para que tenga un poder limpiador óptimo, limpieza máxima por unidad de costo, así como máxima biodegradabilidad (Stadros, 1984).

2. **Etapas de producción del detergente:** En la producción de detergentes, se emplean varios pasos comunes a la mayoría de los procesos; estos pasos se describen a continuación (Stadros, 1984):

a. **Preparación de una pasta a secar:** El proceso de preparación de la pasta se efectúa debido a que, en fase líquida, las reacciones de neutralización e hidratación tienden a tener un mejor desempeño, generando una mayor posibilidad de manejo de materiales con especificaciones diversas. Este proceso de preparación puede dividirse en algunos pasos importantes:

i. **Neutralización:** Es la reacción entre el ácido (generalmente un ácido sulfónico) empleado como generador del ingrediente activo y la soda cáustica. Esta etapa es considerablemente exotérmica, razón por la

que se agrega agua; además de las ventajas que esto le confiere a la mezcla en cuanto a viscosidad se refiere. Los porcentajes de soda caústica y agua cambian desde 31% hasta el 55% para el agua, y desde 9% hasta el 14% para la soda caústica. Sin embargo, esto depende de las características finales de temperatura, concentración y humedad deseadas.

Es importante mencionar que bajo el punto de vista de control de procesos, las principales variables a controlar serían la alcalinidad y el pH, que serán los principales indicadores de que todo el ácido ha reaccionado y se ha convertido en la sal que se emplea como ingrediente base de los detergentes (generalmente dodecil-bencensulfonato de sodio). Sin embargo, también es esencial un buen control de la temperatura y velocidad de agitación, dado que de esto depende la mezcla del agua, ácido y soda caústica; así como también la disolución de los materiales adicionados posteriormente y la absorción de la menor cantidad de aire posible del medio ambiente.

ii. Adición de coadyudantes del ingrediente activo: En este caso, se adiciona al mezclador con la sal neutralizada líquida, algunos componentes que regulan la alcalinidad y ayudan en la limpieza de los productos, pero estos deben de ser resistentes a las altas temperaturas manejadas en el secado del detergentes.

Entre los materiales agregados se encuentran:

- Tripolifosfato de sodio: Este componente es un estabilizador de la alcalinidad, que en su forma hexahidratada captura iones de calcio y magnesio, regulando la dureza del agua y ayudando a que la suciedad se solubilice en el agua. Este componente requiere de temperaturas alrededor de 70°C para hidratarse correctamente.
- Silicato de sodio: También conocido como vidrio soluble, sirve para disminuir la abrasividad del producto final, y para hacerlo más granular, para que no lo arrastren pequeñas corrientes de aire.
- Antiespumante: Este tipo de componentes garantizan la extracción del aire de la pasta, lo cual es fundamental para el bombeo y aspersión en la torres de secado.
- Abrillantadores ópticos: Son componentes que dan la sensación de limpieza y blancura en el lavado.
- Sulfato de sodio: Es un estabilizador de la densidad de la pasta y el detergente, que hace más fácil de bombear las mezclas preparadas.

b. Secado de la pasta: El secado de la pasta se lleva a cabo por medio de una torre de secado por aspersión, a la cual debe bombearse la pasta fabricada con una presión de entre 500 y 1000 psi, para que la aspersión sea efectiva con boquillas especialmente diseñadas para este efecto. La aspersión de la pasta es la base, para que al tener una considerable superficie de contacto, ésta pueda deshacerse del agua y generar un polvo granular, que constituye el detergente.

El secado se lleva a cabo con aire caliente, que al salir del horno de calentamiento puede estar a una temperatura de hasta 450°C. Este calor que recibe la pasta dispersada proporciona la energía suficiente para que el aire se lleve consigo al agua y se obtenga el polvo buscado. Sin embargo, en las torres modernas, el contacto se maximiza al aspersar gotas pequeñas de pasta y someterlas a una torre influenciada por la presión,

donde el aire se pone en contacto con la pasta en contracorriente, y esto retarda su caída, maximizando de esta forma tanto área, como tiempo de contacto, así como también diferencia de concentraciones y temperaturas, que son los principales promotores de la transferencia de masa y calor, que provoca el secado del detergente.

c. Postadiciones: Este proceso consiste en la adición de los materiales que no se pudieron agregar al inicio en la pasta, ya sea porque harían que la misma fuese muy viscosa y difícil de bombear, o porque son sensibles al calor, con lo que el proceso de secado los degradaría o descompondría. Entre los componentes que generalmente se agragan en la postadición, se encuentran:

i. El carbonato de sodio: El cual se emplea como un regulador de la densidad del polvo granular que se obtiene como producto final. Sin embargo, también cumple con funciones de lavado, en donde se encarga de la regulación de la alcalinidad, provocando la saponificación de los materiales o manchas grasosas, que por lo tanto, se vuelven solubles en agua.

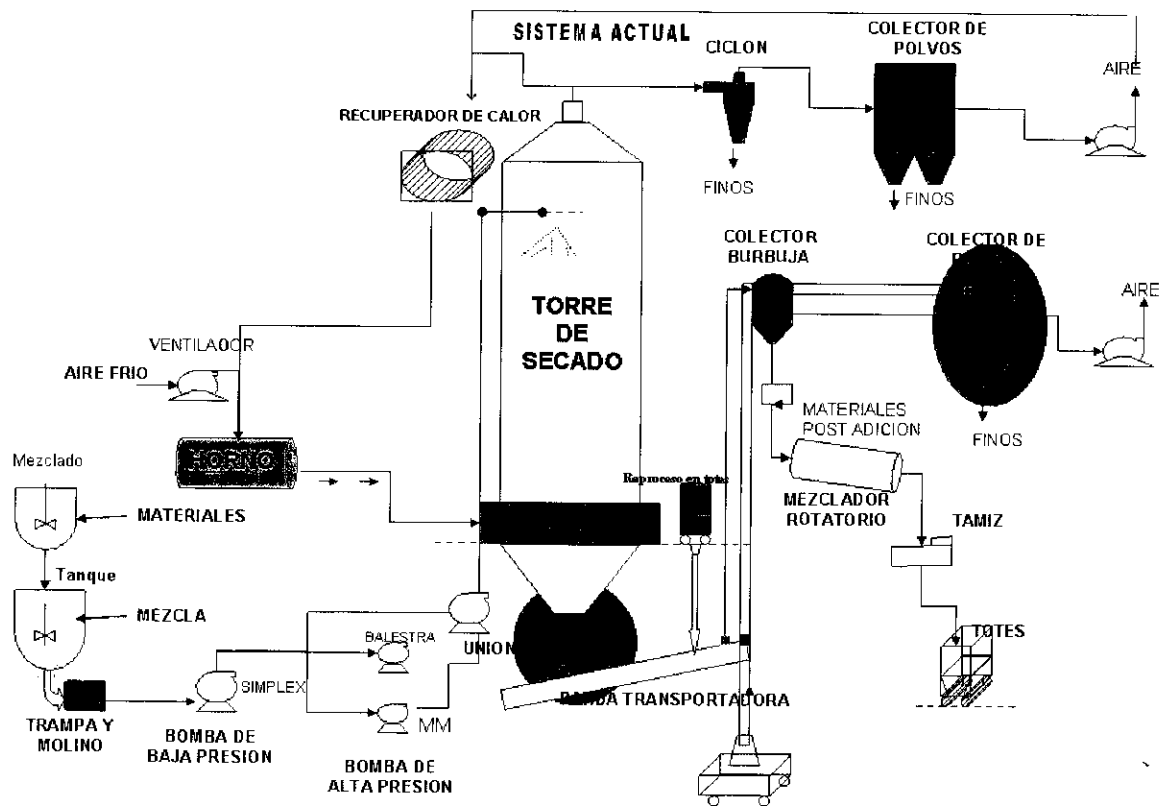


Figura No. 10. Esquema de equipo de un proceso de fabricación de detergente

ii. El perfume: Éste es un componente básico para la comercialización del detergente, ya que debe de tratarse de un olor que proporcione la sensación de frescura, pero que a la vez no reaccione con los componentes del detergente, produciendo mal olor. Su adición debe hacerse luego de secado el detergente,

dado que en general, los perfumes son compuestos volátiles, que a las altas temperaturas manejadas, se evaporarían y escaparían con el aire.

iii. Enzimas y catalíticos: Estos son materiales que en realidad no sirven de nada al proceso de fabricación, sin embargo, su ayuda al lavado es imprescindible, ya que aceleran considerablemente el ataque de las moléculas orgánicas y su solubilización, al mismo tiempo que ayudan en su redeposición sobre los objetos lavados (Stadros, 1984).

## E. Proceso de producción de jabones en barra, cremas lavaplatos y productos limpiadores

1. **Definiciones:** Los jabones en barra de base sintética y las cremas lavaplatos, pueden ser descritos como productos pastosos utilizados en aplicaciones de lavado a mano. Han sido desarrollados desde la década de los años 50, y han ido siendo perfeccionados para aplicaciones específicas de lavado a mano, teniendo una fuerte aceptación en países en vías de desarrollo, porque proveen rendimientos aceptables y buena consistencia para el propósito con que son empleados.

La composición básica de este tipo de productos, consiste en un alquilbencensulfonato, como ingrediente activo; carbonato de sodio, como endurecedor del producto y controlador de la alcalinidad; carbonato de calcio como abrasivo; agua y soda caústica, como ingredientes de la reacción de neutralización del ácido empleado; y en la mayoría de casos sulfato de sodio, que es un estabilizante de la densidad final del producto.

A pesar de que la formulación debe de controlarse de manera adecuada para obtener productos de calidad aceptable, con las características deseadas de dureza e ingrediente activo, también debe tenerse en cuenta los conocimientos del proceso, equipo y empaque necesarios, que llevarán el producto hasta el anaquel con las características requeridas por los consumidores.

2. **Formulación:** La formulación consiste básicamente en establecer la cantidad de algunos compuestos y su tipo o calidad, que deben utilizarse para garantizar la obtención de los productos buscados. En este sentido, existen varios materiales que es necesario regular, entre los cuales se encuentran:

a. **El ingrediente activo:** Comúnmente existen dos tipos de ingrediente activo que se pueden emplear en los jabones sintéticos, que son:

- i. Sulfonato de sodio ramificado
- ii. Sulfonato de sodio lineal

La química de cada uno es totalmente diferente; en general, el ABS ramificado produce pastas que son más fáciles de procesar que aquellas conteniendo ABS lineal, esto se debe a que estas últimas tienden a llegar a viscosidades altas, lo cual no se puede modificar por medio de aditivos, y hace la pasta difícil de procesar. Sin embargo, las pastas de dodecibencensulfonato de sodio lineales tienen una mayor biodegradabilidad, lo que les confiere la propiedad de ser menos contaminantes que las ramificadas; y en general, las lineales presentan una consistencia que provee mejores rendimientos en el lavado a mano.

b. El regulador de densidad: El sulfato de sodio es el compuesto que se emplea para regular la densidad. Sin embargo, no debe de agregarse en proporciones considerables, dado que puede afectar la formación del ingrediente activo, e incluso la hidratación y cristalización del carbonato de sodio, lo que conlleva a la formación de grandes cristales y al endurecimiento irregular de la pasta.

c. El carbonato de sodio: Este material se emplea con dos propósitos principalmente, el primero es regular la alcalinidad de la mezcla y en el lavado, lo cual como en el caso de los detergentes, puede llevar a la saponificación de las grasas cuando se está lavando, y por lo tanto a la solubilización de estos materiales.

El segundo propósito es el de endurecer las pastas o limpiadores, efecto que se debe a la hidratación de este compuesto en el enfriamiento, lo que disminuye la cantidad de agua libre y aumenta la dureza de los productos finales. El grado de hidratación, depende de la temperatura de la mezcla y del ambiente, así como también de la presencia de otros componentes en polvo que puedan interferir en la hidratación.

La hidratación correcta, puede asegurarse por medio de la adición de pequeñas cantidades de humectantes como el sorbitol, que previenen la formación de grandes cristales o endurecimiento irregular.

d. El carbonato de calcio: Este material se emplea generalmente en los productos de limpieza como un abrasivo, que por el lavado a mano, ayuda en la remoción de suciedad por medio de la fricción generada en la acción mecánica que se ejerce sobre el objeto lavado. En general, no se tienen restricciones de adición para este material, sin embargo, debe tomarse en cuenta el balance de sólidos para el endurecimiento, así como también el tamaño de partícula (< 300 mesh) dado que partículas muy grandes de este componente serán base de formación de endurecimiento irregular.

e. El perfume: Este es un material muy importante en el mercadeo y venta del producto, dado que debe proveer de una sensación de limpieza y frescura, sin que interfiera con los objetos, dejando olores, que luego llegan hasta lo que se ponga en contacto con ellos. Además, el perfume debe ser relativamente estable, para que no cambie el olor con el tiempo o los ingredientes. Este componente suele agregarse de último, dado que la reacción de neutralización es exotérmica, y esto podría evaporar el perfume.

3. Proceso de producción de los jabones sintéticos: La producción de jabones sintéticos presenta un flujo simple de materiales, los cuales se mezclan en los denominados mezcladores sigma. Luego de mezclados, los materiales se pasan a un compartimiento de bombeo o transporte, de donde al pasar por los transportadores, son dosificados con una forma dada hacia los empaques designados para cada uno.

El flujo es bastante simple, dado que los mezcladores sigma son multifuncionales, por lo que en ellos se lleva a cabo la reacción de neutralización, la hidratación de polvos y la mezcla final con perfume. Sin embargo, los mezcladores de este tipo proveen de poco margen de error, dado que no se puede manejar viscosidades muy variables por problemas en la agitación de la mezcla y las tiempos de la misma.

El mezclador mencionado en realidad es especial para pastas, y consta de agitadores con forma de sigma, que abarcan casi todo el volumen del mezclador, lo cual garantiza que la agitación de los materiales sea la adecuada como para producir una mezcla homogénea. Esta mezcla homogénea es importante, dado que, de lo contrario, se producen los ya mencionados problemas de cristalización de gran tamaño y de irregularidades en

el endurecimiento, dado que los componentes no llegan a entrar en contacto. Además, la mezcla no debe de ser excesiva en tiempo, porque el consumo de energía de este equipo es considerable por la potencia manejada, con lo que la búsqueda de una homogeneidad debe de hacerse basado en tiempos estándar de agitación.

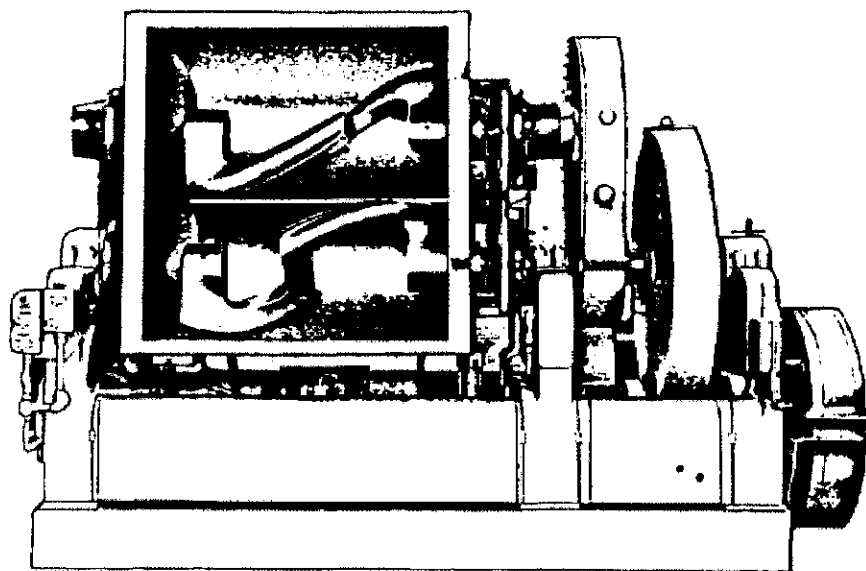


Figura No. 11. Mezclador Sigma

### III. JUSTIFICACIÓN

En los procesos industriales es de especial interés la calidad de producción en todas las áreas; muchos procedimientos se desarrollaron con la idea de estandarizar la forma como se produce en las diferentes líneas de una misma planta, y así garantizar que al final se obtendrá un producto con las características buscadas, sin importar que línea lo produjera.

En las plantas de fabricación de jabones y detergentes, por lo general se cuenta con mezcladores por lotes, en los que se realiza una adición de agua, soda cáustica y ácido dodecibencensulfónico; esto genera una solución de dodecibencensulfonato de sodio, que es el denominado ingrediente activo de muchos productos de limpieza. Estos mezcladores, en muchos casos funcionan como equipo para la reacción de neutralización y también para el mezclado de los componentes adicionados posteriormente.

A pesar de que este sistema funciona para generar ciertas características buscadas en los productos, la humedad y el Ingrediente Activo de los mismos, no presentan una variabilidad aceptable. Esto se debe a que las características de la materia prima pueden cambiar de un momento a otro, cambiando las condiciones iniciales de reacción, y por lo tanto, la temperatura de operación, cantidad de agua evaporada y concentración del ingrediente activo en la neutralización.

Pero además, el contar con un mezclador para la reacción, representa un tiempo muerto de agitación necesario para que se lleve a cabo y para que el agua se evapore hasta la alcanzar la concentración deseada; este tiempo representa una inversión económica seria, y esto, sin tomar en cuenta las cantidades de materiales sobreadicionados para que las cargas cumplan con algunos requerimientos, y los peligros que representa industrial y ambientalmente, el operar bajo condiciones no controladas una reacción altamente exotérmica.

El control del proceso de neutralización y formación de la sal empleada como ingrediente activo, puede llevarse a cabo fácilmente con la instalación de un reactor químico continuo controlado. Esto, traería ventajas de seguridad, al operar bajo condiciones controladas, reducción de tiempos muertos y de espera en el control de calidad, facilidad de producción, e incluso, reducción de costos y estandarización del proceso de generación del ingrediente activo.

El diseño de un reactor puede hacerse por medio de ecuaciones teóricas que proporcionan los volúmenes necesarios del reactor, en función de la velocidad de reacción y de las concentraciones iniciales y finales de reactivos. Por esto, el área experimental del estudio propuesto es indispensable en la determinación de la velocidad de reacción y propiedades de los productos, que deban tomarse en cuenta para el diseño de un reactor. Todo esto puede servir como referencia para otras plantas de fabricación de productos de limpieza, que debido a la tendencia de poseer mayor control sobre los procesos, necesiten cambiar de los sistemas por lotes a un reactor de tipo continuo.

## IV. OBJETIVOS

### A. Objetivo general

Diseñar un reactor de tipo continuo, en el que se pueda llevar a cabo la reacción de neutralización entre el ácido dodecilbencensulfónico, como medio de generación del ingrediente activo en plantas de detergentes y jabones en Guatemala.

### B. Objetivos específicos

1. Encontrar experimentalmente el comportamiento de las propiedades del Dodecilbencensulfonato de sodio en solución, con respecto a la temperatura con que se trabaja el sistema.
2. Encontrar experimentalmente el calor estándar de la reacción de neutralización entre el ácido dodecilbencensulfónico y el hidróxido de sodio.
3. Encontrar una ecuación experimental que relacione la capacidad calorífica específica a presión constante del dodecilbencensulfonato de sodio y del ácido dodecilbencensulfónico con la temperatura.
4. Determinar experimentalmente una ecuación para la cinética de reacción a las condiciones de operación buscadas.
5. Diseñar el equipo necesario, para que la reacción pueda darse dentro de un rango de temperaturas y concentraciones establecido.
6. Realizar un análisis de la inversión necesaria para la construcción del equipo y los beneficios económicos obtenidos con su instalación.

## V. PROBLEMA

Al fabricar productos limpiadores, es necesario el empleo de sales de ácidos carboxílicos que ayuden a la solubilización de las manchas y suciedades hidrofóbicas. En las plantas de jabones y detergentes que se tienen en Guatemala, se producen estas sales a partir de la reacción de neutralización del ácido dodecibencensulfónico con soda cáustica o hidróxido de potasio; estas reacciones se llevan a cabo en mezcladores por lotes, que originan un bajo control del proceso y generan costos considerables por tiempos y materiales perdidos en la destrucción o modificación de las cargas hechas.

Por lo tanto, en la industria guatemalteca de productos de limpieza debe de idearse alguna manera de controlar la generación del dodecibencensulfonato de sodio, a modo de que pueda dosificarse como un material homogéneo y de características controladas a cada una de las cargas de limpiadores que utilicen este componente como ingrediente activo.

## VI. METODOLOGÍA

Con el objeto de poder llevar a cabo las pruebas en el laboratorio, llegar a resolver el problema planteado y conseguir alcanzar los objetivos generales y específicos, es necesaria la formulación de la siguiente metodología de trabajo. Debe notarse, que debido a complejidad del sistema a desarrollar, la etapa experimental a nivel laboratorio es indispensable en el diseño y en la obtención de conclusiones válidas.

- A. Producir en el laboratorio una pasta de dodecibencensulfonato de sodio con concentración conocida, que permita la determinación de las propiedades de las misma a diferentes temperaturas, y que ayude a asegurar que la pasta a producir es manejable a gran escala por medio de sistemas de bombeo y agitación.
- B. Analizar por métodos estándar de laboratorio muestras de la pasta fabricada en el laboratorio. Una sola muestra de la pasta es suficiente para asegurar que ésta cumple con los requerimientos del ingrediente activo de cualquiera de los productos fabricados.
- C. Determinar por medio de un análisis térmico, el calor específico de la reacción de neutralización del ácido dodecibencensulfónico y el hidróxido de sodio. Así como también, encontrar la capacidad calorífica específica del ácido dodecibencensulfónico y del dodecibencen sulfonato de sodio, para establecer el rango de temperaturas en que debe trabajar el reactor y el equipo a diseñar.
- D. Encontrar experimentalmente una ecuación que relacione la velocidad de reacción con las concentraciones de los reactivos, recurriendo a la pasta preparada, como medio de simulación de un reactor a escala de laboratorio, y a un análisis de transferencia de calor, como indicador del avance de la reacción.
- E. Analizar por métodos estándar de laboratorio las muestra producidas con la pasta y la posterior adición de ácido y base, para comprobar que las condiciones analizadas se siguieron manteniendo durante la determinación de la ley de velocidad.
- F. Determinar a partir de las pruebas realizadas en los apartados anteriores, el rango de temperaturas y concentraciones en las que debe de operar el reactor, para que la pasta extraída cumpla con los requerimientos básicos de calidad.
- G. Determinar el volumen del reactor adecuado para la producción, por medio de las ecuaciones de diseño de los reactores químicos continuos.
- H. Diseñar el equipo necesario para la operación del reactor químico.
- I. Determinar la inversión necesaria para la compra e instalación del equipo adecuado para la realización de la reacción de neutralización, y analizar el tiempo de recuperación de dicha inversión, con los beneficios económicos que genere la instalación.
- J. Analizar la información obtenida, sacar conclusiones y recomendaciones sobre los experimentos realizados a escala laboratorio y sobre el equipo diseñado. En el caso de que el diseño del reactor no resultara económicamente viable, determinar la causa y proponer soluciones alternas al problema a solucionar.

## VII. RESULTADOS

Tabla No.2: Resultados obtenidos experimentalmente para la viscosidad de la solución de dodecibencensulfonato de sodio al 58.7% (m/m), con respecto a la temperatura de la misma

Temperatura de la muestra de dodecibencensulfonato de sodio en solución al 58.7% (°C±0.05 °C)	Viscosidad (Pa s +/- 5x10 <sup>-4</sup> Pa s)
45.10	4.152
50.05	4.250
55.35	4.632
60.15	4.829
65.25	4.951
69.95	5.312
75.35	5.461
80.05	5.617

Tabla No.3: Resultados obtenidos experimentalmente para la fórmula de fabricación de la pasta de dodecibencensulfonato de sodio concentrado al 58.7% (m/m)

Material a utilizar	Porcentaje empleado del material en la fórmula (% m/m)
Agua tratada	31.00%
Soda cáustica 50% (m/m)	14.00%
Ácido sulfónico lineal (96.5% (m/m))	55.00%

Tabla No.4: Resultados obtenidos experimentalmente para el calor estándar de disolución de la soda cáustica al 50% (m/m), así como para el calor estándar de reacción del ácido dodecibencensulfónico con soda cáustica disuelta

Calor estándar de disolución de la soda cáustica al 50% (m/m) (kJ/mol±0.42 kJ/mol)	Temperatura de determinación del calor estándar de disolución (°C±0.01 °C)
-10.12	35.06
Calor estándar de reacción del ácido dodecibencensulfónico con soda cáustica diluida (kJ/mol±25.85 kJ/mol)	Temperatura de determinación del calor estándar de reacción (°C±0.01 °C)
-475.44	56.05

Tabla No.5: Resultados obtenidos experimentalmente para las ecuaciones de determinación de las capacidades caloríficas específicas en función de la temperatura

Ecuación obtenida para la capacidad calorífica específica del ácido dodecibencensulfónico	Ecuación obtenida para la capacidad calorífica específica del dodecibencensulfonato de sodio
$C_p[J/(g \text{ } ^\circ\text{C})] = 4 \times 10^{-6} T[^\circ\text{C}]^4 - 0.0009 T[^\circ\text{C}]^3 + 0.071 T[^\circ\text{C}]^2 - 2.1917 T[^\circ\text{C}] + 32.865$	$C_p[J/(g \text{ } ^\circ\text{C})] = 2 \times 10^{-6} T[^\circ\text{C}]^4 - 0.0006 T[^\circ\text{C}]^3 + 0.05 T[^\circ\text{C}]^2 - 1.5985 T[^\circ\text{C}] + 39.43$
Ecuación obtenida para la capacidad calorífica específica de la soda cáustica al 50% (p/p)	Rango de temperaturas en el que son válidas las ecuaciones (°C±0.01 °C)
$C_p[J/(g \text{ } ^\circ\text{C})] = -8 \times 10^{-7} T[^\circ\text{C}]^4 + 0.0002 T[^\circ\text{C}]^3 - 0.0141 T[^\circ\text{C}]^2 + 0.5291 T[^\circ\text{C}] - 2.0854$	25.0 °C - 90.0 °C

Tabla No.6: Resultados obtenidos experimentalmente para la ecuación aparente de la cinética de reacción obtenida

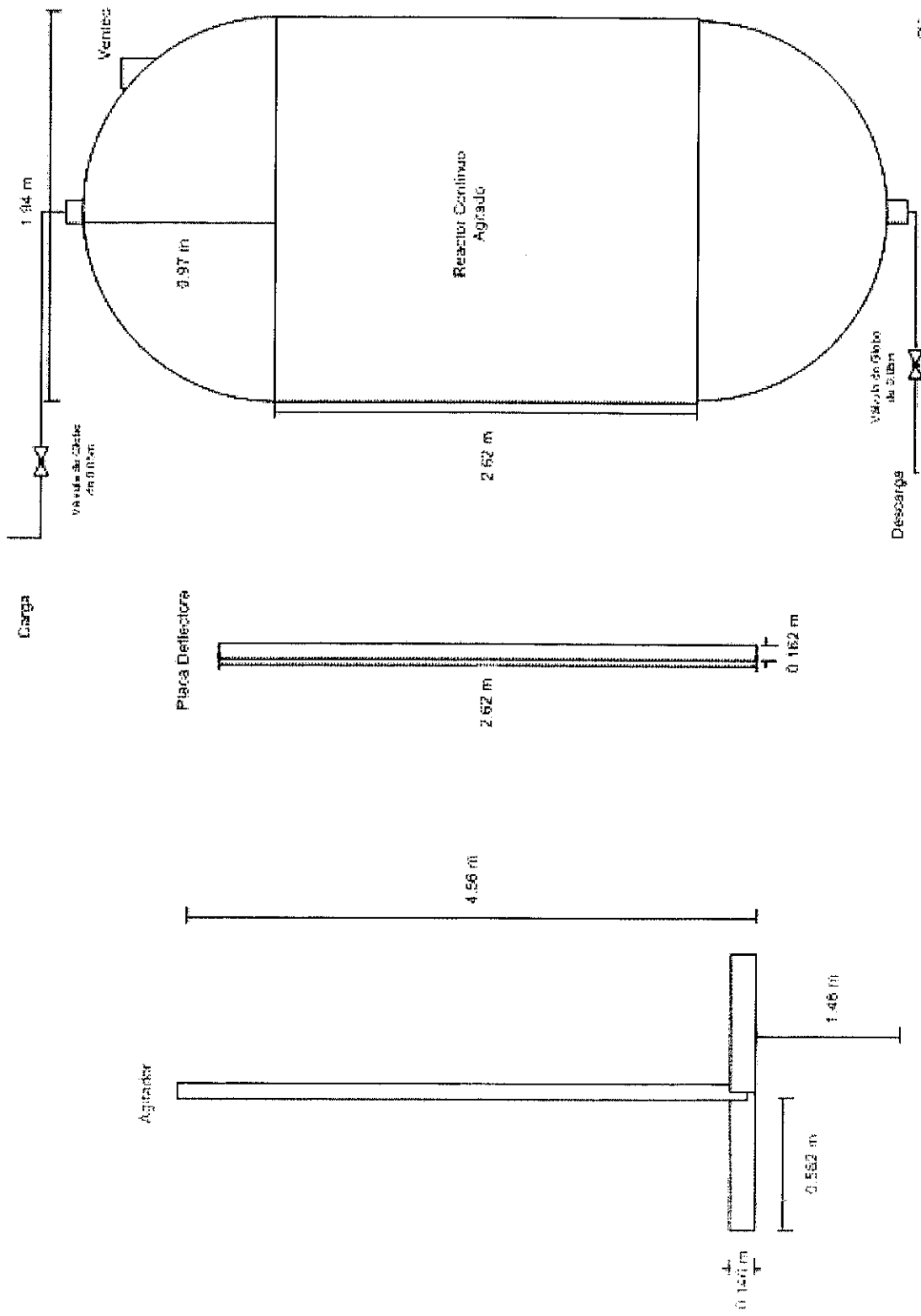
Constante de proporcionalidad de la ecuación de la cinética de reacción ( $s^{-1}$ )	Orden de la reacción con respecto a la concentración de ácido sulfónico
0.764	1
Ecuación obtenida para la cinética aparente de reacción:	Temperatura de determinación de la cinética de reacción ( $^{\circ}C \pm 0.87^{\circ}C$ )
$r = 0.7642C_A^1$	66.09

Tabla No.7: Resultados obtenidos experimentalmente para el diseño de los diferentes equipos necesarios en la reacción de neutralización

Equipo a utilizar en la reacción	Volúmen del equipo	Materia de Construcción	Altura (m)	Diámetro (m)	Velocidad de giro (rpm)	Potencia (kW)	Área de transferencia de calor ( $m^2$ )	Flujo de agua de enfriamiento (kg/s)	Condiciones de Operación
Reactor de neutralización	Volumen efectivo = 8110 L. Volumen de diseño = 11572 L. Tiempo de residencia = 3.6 h	Acero Inoxidable 316	2.62	1.94	Forma: Cilíndrica con semiesferas en los costados	-	-	-	isobárico a 85.3 kPa e isotérmico a 65 $^{\circ}C$
Agitador de Paletas	-	Acero Inoxidable 316	Altura paletas = 0.15 m	1.16	140	-	-	-	Velocidad de giro constante
Reductor de Velocidad	-	Acero al Carbón	-	-	Salida = 140rpm, Entrada = 1190rpm	75	-	-	-
Motor del agitador	-	-	0.56	0.46	1190	75	-	-	-
Variador de Frecuencias y Arrancador	-	-	variador = 0.88	-	Protección de sobrecorriente, temperatura alta o voltaje fuera de rango.	75	-	-	-
Chaqueta de enfriamiento	-	Acero al Carbón con tratamiento térmico	-	-	-	-	27.8	58.8	-

Tabla No.8: Resultados obtenidos experimentalmente para el análisis de los beneficios obtenidos con el empleo del reactor de neutralización, así como para la inversión necesaria en maquinaria y equipo

Costo del reactor de neutralización	Costo de la chaqueta de enfriamiento del reactor	Costo del sistema de agitación	Inversión total necesaria en maquinaria y equipo
Q 721,244.44	Q 309,104.76	Q 901,555.56	Q 3,722,347.93
Total de beneficios económicos mensuales obtenidos con la instalación del reactor	Total de beneficios económicos anuales obtenidos con la instalación del reactor	Tiempo estimado de recuperación de la inversión (años)	Tiempo estimado de recuperación de la inversión (meses)
Q 536,667.19	Q 6,440,006.24	0.58	6.94



Sin escala  
Vista frontal

Figura No. 12: Esquema del reactor continuo agitado y del sistema de agitación a construir

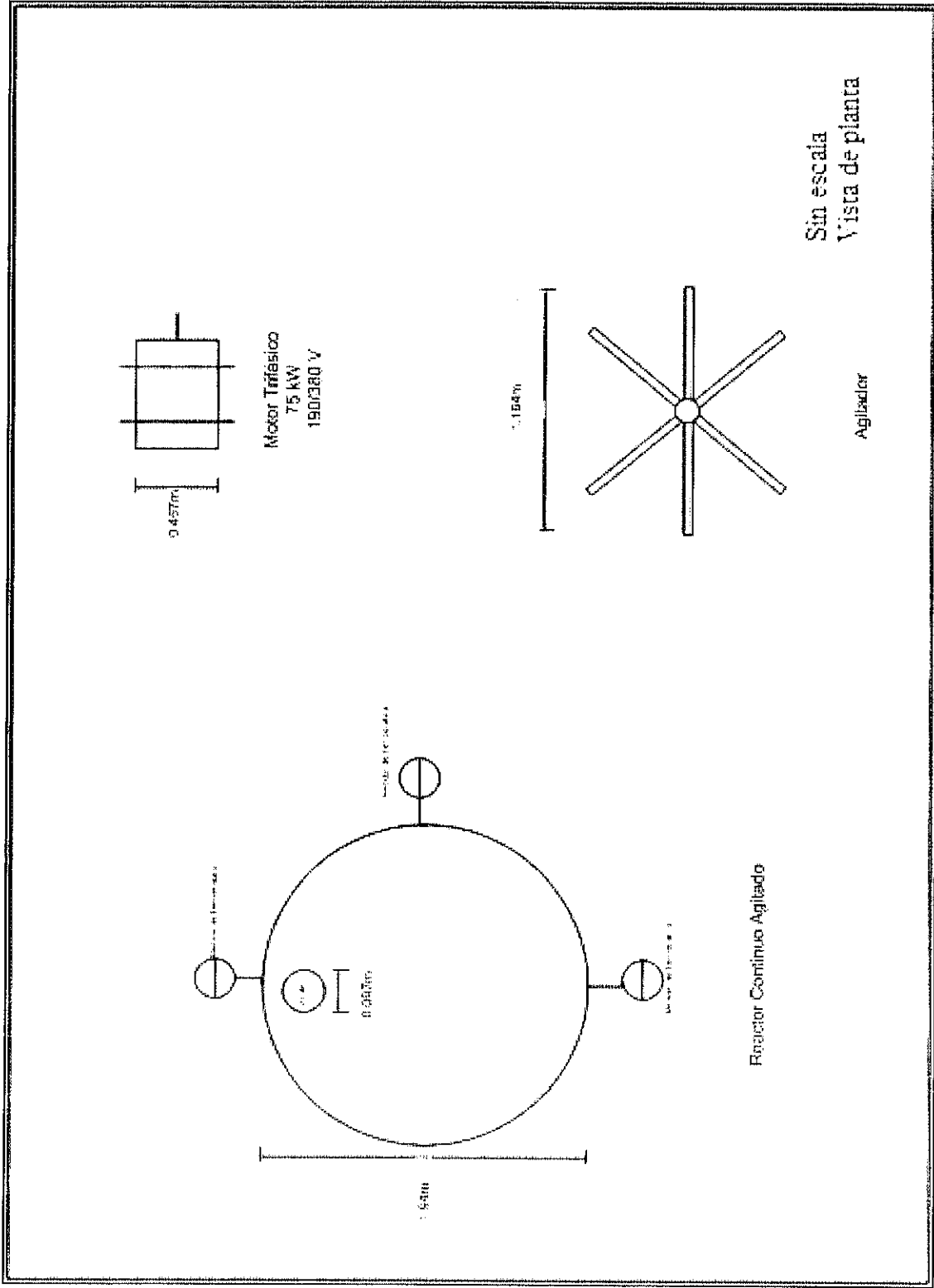
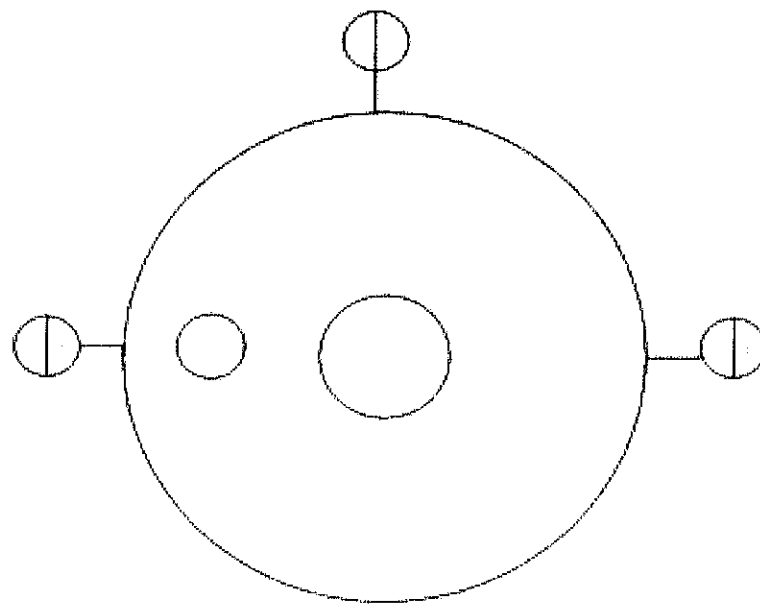
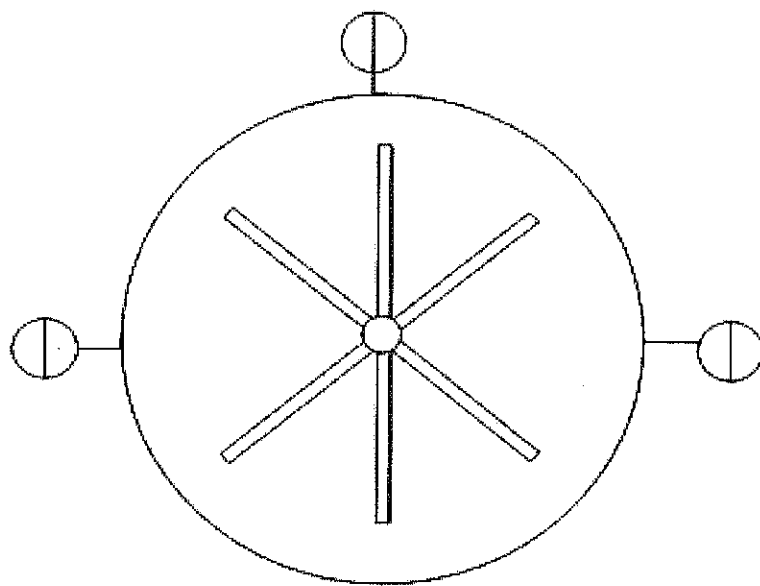


Figura No. 13: Esquema del reactor continuo agitado y del sistema de agitación a construir



Reactor continuo agitado (vista de planta.)

Sin escala



Reactor continuo agitado (corte transversal)

Figura No. 14: Esquemas de vista de planta del reactor continuo agitado, incluyendo el sistema de agitación.

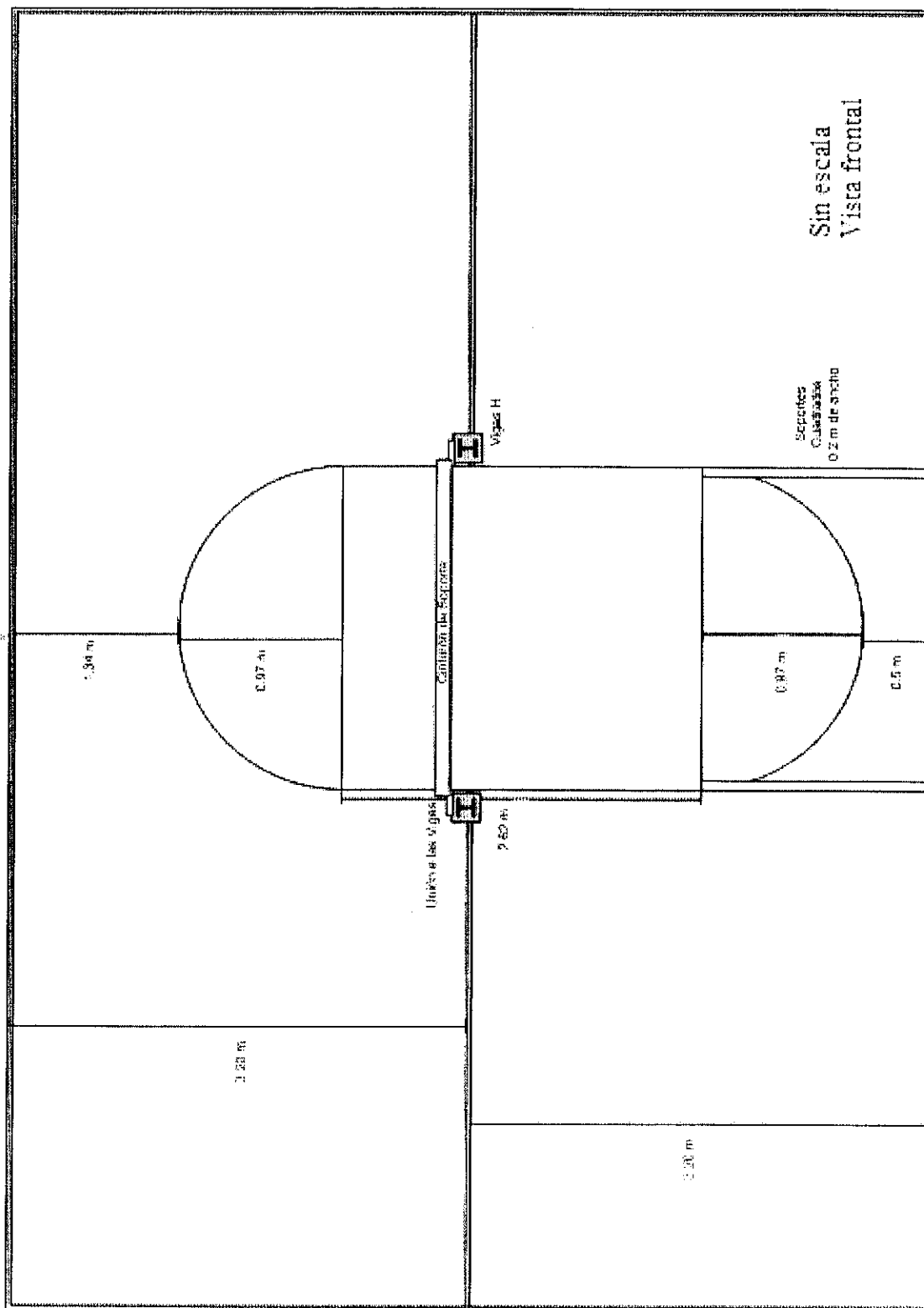


Figura No. 15: Diagrama de la soportaria empleada en el reactor a construir

## VIII. DISCUSIÓN

El diseño de reactores integra varias áreas del campo de la Ingeniería Química, que deben conjugarse para poder llegar a establecer los valores de las variables esenciales que hay que calcular y de este modo, obtener la información necesaria para la construcción del equipo. Entre los resultados obtenidos, es necesario el dividir en dos secciones el estudio elaborado, sobre el diseño de un reactor para la neutralización del ácido dodecibencensulfónico. Estas secciones son la parte técnica del proyecto y la parte económica.

En lo que se refiere a la parte técnica del proyecto, es necesario mencionar, que según los resultados obtenidos a nivel laboratorio y según los cálculos efectuados durante el estudio (ver Tablas No.2-7), el desarrollo del proyecto propuesto es factible, y dependiendo de las condiciones de operación que se seleccionen y del tipo de reactor a utilizar, se obtendrán equipos que no requieren de tecnología extra a la que ya se posee en la industria, donde se desarrolló el estudio.

El primer procedimiento técnico realizado, fue el escoger la fórmula a emplear en el reactor continuo agitado. Para esto, se desarrollaron varias fórmulas, basadas en los requerimientos de la pasta a generar para la planta de detergentes (referirse a la Tabla No.9); y se desarrollaron de esta manera, dado que los requerimientos de la pasta proveniente de la neutralización para jabones presentan un menor ingrediente activo, es decir, que la pasta requerida contiene mayor cantidad de agua que la de detergentes. De este modo, se desarrolló un cálculo estequiométrico, que permitió el estimar el porcentaje necesario de cada uno de los tres componentes de la reacción. Luego del cálculo, se comprobó experimentalmente, que la tercera fórmula propuesta, mostrada en la Tabla No.3, presenta los resultados analíticos más aceptables o cercanos a los valores buscados. En realidad, este es un resultado que se esperaba, dado que las otras fórmulas desarrolladas, están basadas en la ya mencionada y modifican la cantidad de ácido dodecibencensulfónico agregado y de agua, dejando la cantidad de base constante.

El problema principal presentado por las otras fórmulas es que al agregar menos ácido y más agua, el potencial de hidrógeno (pH) sube, dado que se tiene mayor cantidad de base sin reaccionar; mientras que al aumentar la cantidad de ácido, el pH desciende y el riesgo de reacción incompleta aumenta, de modo que el reactivo limitante debe ser siempre el ácido. La reacción incompleta del ácido, traería la desventaja, que tanto en jabones como en detergentes, se agregan cantidades considerables de sólidos, que deben de hidratarse por medio del agua presente en la pasta y si existe alguna cantidad de ácido sin reaccionar, generalmente se presentan problemas con el aroma o color de los productos, por la adsorción del ácido en los sólidos granulares.

También se obtuvieron datos de la viscosidad de la fórmula empleada en función de la temperatura de operación, los cuales son un indicador de la factibilidad de operación a diferentes temperaturas. Sin embargo, el fijar la temperatura, depende más de los requerimientos de proceso, ya que las propiedades generales de la pasta no cambian considerablemente con la temperatura, siendo la más sensible la viscosidad, que afecta directamente en la agitación y posterior bombeo de pasta.

Entonces, se puede mencionar que la temperatura necesaria para la operación es de 65°C, base sobre la que se buscó efectuar las determinaciones posteriores. Esto se debe principalmente a que en el proceso de

fabricación de detergentes, se tiene que hidratar compuestos, cuyo equilibrio depende directamente de la temperatura, por lo que si la temperatura de la pasta se encuentra fuera del rango de las temperaturas necesarias, se obtendrán características no deseadas en el detergente. El rango establecido de temperaturas de hidratación de los materiales de postadición varia, pero se encuentra en el rango de 55 a 70°C. Esta postadición consta de agregar perfume, aditivos, colorantes y abrasivos, que modifican la base y permiten la fabricación de diferentes tipos de producto con el mismo ingrediente activo.

Luego de este cálculo, se procedió a la determinación de la capacidad calorífica específica de cada uno de los materiales a emplear. Este procedimiento se desarrolló por medio de un aparato y un procedimiento desarrollados experimentalmente, por lo que los resultados obtenidos no son tan confiables como los que se pudieron obtener con los métodos de análisis de la pasta. A pesar de las aproximaciones realizadas en el proceso, debe mencionarse que el cálculo confiere la ventaja de que se manejó un rango estricto de temperaturas, que son las que deberían de emplearse experimentalmente, por lo que las ecuaciones obtenidas en función de la temperatura para todos los materiales, son datos experimentales necesarios, por la carencia de datos teóricos de la capacidad calorífica de los mismos.

Como segunda variable calculada, se encuentran los calores estándar de reacción y disolución, que según se muestran en la Tabla No.4, representan reacciones exotérmicas, que benefician el arranque de la operación, pero a su vez, provocan la necesidad de un sistema de control de la temperatura del reactor. El procedimiento del cálculo de estos calores, al igual que el de las capacidades caloríficas, fue desarrollado experimentalmente, debido a la carencia de datos teóricos que pudieran emplearse como referencia.

Ahora bien, por medio de los dos valores anteriores, se llega a la determinación de la cinética de la reacción de neutralización, que se muestra en la Tabla No.6. Tanto el calor de reacción, como las capacidades caloríficas, son indispensables en el cálculo realizado, ya que como se muestran en el Apéndice L, el cálculo de la cinética es totalmente térmico, es decir, que basándose en las curvas de tiempo contra temperatura, se llegó a obtener la ecuación de la cinética de reacción. Este procedimiento se efectuó así, debido a la carencia de algún medio analítico que permitiera el detener la reacción, para determinar las concentraciones de reactivos en solución, a un tiempo dado y poder con estos datos, determinar la velocidad de reacción. Este hecho resta exactitud al cálculo, dado que térmicamente se tiene la desventaja de la dependencia de la transferencia de calor, para que se produzca el cambio de temperatura en el sistema, con lo que la relación del cambio de la concentración de reactivos en solución, en función del cambio de la temperatura, probablemente presenta valores experimentales menores a los que suceden en realidad en la reacción.

Además, en el cálculo de la cinética se realizó otra aproximación que debe justificarse, y es que al emplear una fórmula fija, la concentración de base en solución, puede expresarse en función de la concentración de ácido en la misma, con lo que la expresión de la ecuación de la cinética de reacción queda únicamente en función de la concentración del ácido empleado. Esto simplifica considerablemente los cálculos, pero tiene que tomarse en cuenta en el proceso, dado que si alguno de los flujos de material llegara a cambiar con el tiempo, los flujos de los demás materiales deberían de ajustarse automáticamente o la cinética dejaría de tener validez,

dado que la concentración de un reactivo en solución no podría expresarse en función de la concentración del otro reactivo.

En lo que se refiere al diseño de equipo, es necesario mencionar principalmente, que se pudieron obtener varios datos de las dimensiones necesarias para la construcción, siendo las principales, las del sistema de agitación y las del recipiente que constituye el reactor en sí. El reactor se diseñó con una forma particular, que reduce la acumulación de presión en el fondo del sistema, a la vez que evita que el material de viscosidad considerable se acumule en orillas o esquinas. Esta forma semiesférica, trae la ventaja de que aumenta el volumen del reactor, lo que le confiere un espacio extra disponible, si se requiere de un variación de densidades o por si se presenta el caso común de absorción de aire en la pasta.

Ahora bien, puede notarse que el reactor diseñado es del tipo continuo agitado, el cual se escogió preferentemente sobre los del tipo tubular y por lotes, debido a que los tubulares tienen desventajas en el control de la temperatura, que es esencial en la reacción manejada; mientras que los del tipo por lotes presentan la desventaja de que no proveen de un flujo constante de pasta a las plantas de fabricación de jabones y detergente, lo cual provoca tiempos muertos de espera de fabricación del material o puede elevar el volumen del reactor a emplear considerablemente, a modo de que siempre se tenga suficiente pasta para alimentar a las plantas.

A pesar de las consideraciones posteriores, el valor principal que debe de obtenerse en el diseño de un reactor continuo agitado, es el volumen; el cual depende directamente en este tipo de reactores, de la cinética de reacción y los flujos que deben de manejarse, así como de la conversión de los reactivos. Debido a los puntos ya discutidos sobre las reacciones incompletas y sus efectos sobre los productos terminados, es necesario mencionar que la conversión se determinó en un valor muy cercano a 100%, que fue de 99.99% y que permitió obtener el volumen del reactor. Además, con este mismo dato, se pudo calcular el tiempo medio de residencia en el reactor, que fue de 3.6 h, y que por ser directamente proporcional a la conversión, representa un valor considerable, a pesar de la cinética favorable que la reacción presenta para convertir reactivos en productos, en tiempos cortos.

En este caso, es necesario agregar que el tiempo de residencia también es directamente proporcional al volumen del reactor, y en realidad representa la capacidad que el mismo tendrá, para mezclar los componentes de manera tal, que la reacción pueda llegarse a considerarse como completa al extraer el producto del reactor.

El diámetro de ventilación, es otra de las estimaciones que pudieron efectuarse para dimensionar en el reactor. Esto se realizó con los datos de diseños de equipos similares y reglas gruesas, sin embargo, sería aconsejable el realizar un estudio sobre el secado de la pasta a fabricar a la temperatura de operación del equipo, dado que si bien, el espacio de ventilación garantiza la salida de los vapores de agua que se produzcan, puede producir un cambio en la presión del sistema, si no se cuenta con la apertura necesaria, lo cual no pone en peligro el proceso en sí, sino el equipo, ya que se encuentra diseñado para la operación a presión atmosférica.

En lo que se refiere al sistema de agitación, es necesario mencionar que lo más adecuado es el empleo de un agitador de palas inclinadas a  $45^\circ$ , que permita el manejo de materiales viscosos, siendo a la vez flexible en cuanto a operación, para que permita crear suficiente turbulencia dentro del recipiente, como para que se considere homogéneo el medio de reacción y los cálculos sean válidos. Este tipo de agitador se escoge por sus ventajas en cuanto a datos previos presentes en la literatura, dado que otros tipos de agitadores se han estudiado menos y las potencias a consumir por los mismos son difíciles de estimar. Además, este tipo de agitador tiene un mejor desplazamiento de material en los patrones de flujo buscados, lo cual no puede garantizarse de manera adecuada con otros tipos de agitadores.

Además, puede mencionarse que el uso de placas deflectoras en el sistema es esencial en la formación de los patrones de flujo deseados para el mezclado correcto del ácido y la base empleados, dado que se busca la homogenización y no la formación de un solo vértice interno.

Puede notarse el hecho que el sistema de agitación, tiene que contar con un variador de frecuencias para el motor trifásico a emplear. Este equipo tiene un doble propósito, dado que representa una protección para el motor, en lo que se refiera a variaciones de corriente o voltaje. Pero, a la vez, es un medio de variación de la velocidad de giro del motor, que puede servir como herramienta para que la velocidad de agitación sea variable y al mismo tiempo, incluye rutinas de arranque y paro del motor, lo cual disminuye los consumos altos de potencia del sistema, y minimiza los costos de utilización de la energía eléctrica en la operación.

Los materiales de construcción de todos los equipos que entran en contacto directo con reactivos, deben ser resistentes a la corrosión, por lo que todos los cálculos de costos se efectuaron en acero inoxidable 316, que es resistente a la corrosión, sobre todo a temperaturas considerables, como la empleada en el reactor continuo agitado diseñado.

Como ya se mencionó anteriormente, el control de la temperatura es esencial en la reacción de neutralización, por lo que es indispensable el empleo del medio de enfriamiento, en este caso, se diseñó una chaqueta para el reactor. Sin embargo, sería aconsejable desarrollar un estudio sobre el empleo de serpentines de enfriamiento que podrían resultar ventajosos económicamente. En el estudio realizado se optó por el diseño de la chaqueta, dado que no interfiere con el sistema de agitación, ya que la transferencia de calor es por medio de la pared del reactor; sin embargo, los serpentines de enfriamiento pueden ser un medio útil para que los costos disminuyan, a pesar de poder interferir con el sistema de agitación del reactor. En este punto es importante mencionar, que en el cálculo efectuado, no se elimina el calor empleado en la evaporación de agua, lo cual como se mencionó anteriormente tiene que estudiarse cuidadosamente, para poderlo considerar también dentro del sistema de enfriamiento a utilizar en el reactor.

La chaqueta diseñada abarcó todo el reactor, esto se llevó a cabo de esta manera, para evitar que se necesiten dispositivos extra posteriormente, si se decide el variar el volumen de líquido que contenga el recipiente que constituye el reactor o si la cantidad de producto a manejar en dicho equipo cambia.

La soportería del reactor se diseñó para el lugar en el que se pretende colocarlo, dado que es en el medio de dos pisos de operación, donde permite el empleo de una estructura completa, ya instalada y capaz de soportar muchas veces el peso del reactor. A partir de esto, se puede emplear la base de las columnas H presentes en los

diferentes pisos, como medio de soporte lateral y de fijar el reactor contra el movimiento horizontal, mientras que los soportes verticales, se encuentran diseñados a partir de cuatro columnas de Hierro de 0.2 m de espesor, que soportarían totalmente el peso del reactor, sin el soporte de las vigas H.

Todo este equipo diseñado permite que el reactor se ajuste a condiciones fijas de operación, de modo que debe operar isotérmica e isobáricamente. La operación isobárica, en realidad, no es importante para la obtención de los productos, dado que teórica y prácticamente, la variación de presión afecta de manera muy ligera, la cinética de reacción. Sin embargo, este parámetro sí es indispensable, dado que representa la seguridad de operación del equipo, que fue diseñado para la operación a presión atmosférica. Mientras tanto, la condición isotérmica, es necesaria a 65°C, dado que la temperatura afecta drásticamente la cinética de reacción y que el resto de procesos a realizar con el producto obtenido del reactor, requieren de un rango de temperaturas, lo cual obliga al funcionamiento a la temperatura especificada, para evitar el gasto de energía extra en los procesos de postadición.

Además, debe mencionarse que todos los equipos que entran en contacto directo con reactivos o productos, tienen que construirse de acero inoxidable, para garantizar su resistencia a la corrosión y a la temperatura de reacción de los compuestos manejados. Sin embargo, el resto de equipos, como la chaqueta de enfriamiento o el reductor de velocidad, pueden hacerse de acero al carbón, dado que no presentan un contacto directo con materiales corrosivos y su construcción en este material, trae beneficios de reducción de costos de equipo.

Por otro lado, en lo que respecta a la parte de factibilidad económica, el caso es tiende a ser muy parecido al de la factibilidad técnica, dado que el análisis de estimación de costos refleja que el tiempo de recuperación de la inversión de capital necesario es aceptable, lo cual es un indicador financiero de los beneficios económicos que se obtendrán con la instalación del reactor. Este indicador financiero permite afirmar que, a pesar de los considerables costos de equipo involucrados en la instalación del reactor continuo agitado, el proyecto es factible económicamente.

El proyecto posee varias ventajas que lo hacen factible económicamente: la primera es el ahorro en materiales extra empleados en los procesos actuales por lotes, la segunda, es la reducción de costos de mano de obra, ya que se espera que el personal requerido en la preparación del dodecibencensulfonato de sodio se reduzca considerablemente y el tercero, se refiere al ahorro del tratamiento requerido para desechar las bases generadas manualmente por lotes, ya que el reactor representa un proceso más controlado de generación de ingrediente activo. Todo esto provoca un ahorro de cerca de 6.5 millones de quetzales anuales. Y esto combinado con las ventajas de seguridad y medio ambiente, lleva a deducir que económicamente el proyecto no presentará ventajas inmediatas, pero será una inversión que hará de la producción de jabones y detergente un proceso más seguro, controlable y amigable al medio ambiente.

Las ventajas de seguridad se presentan sobre todo en conjunto con el control del proceso, ya que actualmente la dosificación es manual para ciertos materiales, lo que implica el empleo de personas que llegan a estar cerca de reacción químicas exotérmicas violentas. Claramente, esto se evita con la instalación del reactor continuo agitado, dado que este equipo provee de un medio aislado de control de la reacción de neutralización del ácido dodecibencensulfónico.

Mientras tanto, las ventajas de medio ambiente se refieren principalmente al concepto de reducción de la cantidad de desechos generados. Este es un punto muy importante, dado que en muchos casos, las producciones que se encuentran fuera de especificaciones, por errores en el procedimiento o en el manejo, deben desecharse en forma de lodos o de agua a tratar. De cualquier manera, estos desechos tienen que ser tratados, y según el procedimiento, llevados a lugares certificados en el tratamiento de desechos químicos, por lo que la instalación del reactor trae un ahorro de este tratamiento, que se considera en el cálculo del tiempo de recuperación de la inversión necesaria.

Finalmente, puede mencionarse con todos los resultados obtenidos, que el reactor diseñado es un proyecto factible técnicamente y económicamente. Y a pesar de que presenta la desventaja de ser un equipo costoso, es factible debido al aceptable tiempo de recuperación de la inversión calculado, que es de aproximadamente 0.58 años.

## IX. CONCLUSIONES

- A. La construcción del reactor continuo agitado para la neutralización del ácido dodecilbencensulfónico, es factible técnicamente y económicamente.
- B. El proyecto de instalación del reactor continuo agitado, presenta un tiempo aceptable de recuperación de la inversión de 0.58 años.
- C. Experimentalmente se encontró la ecuación aparente de la velocidad de reacción, siendo de orden 1 y en dependencia únicamente de la concentración de ácido sulfónico en solución.
- D. El reactor continuo agitado debe contar con dos sistemas principales, que son el de agitación y el de enfriamiento, los cuales se diseñaron para que permitan la agitación continua y la operación a una temperatura estable.
- E. El reactor continuo agitado diseñado debe de operar isotérmicamente e isobáricamente, a una temperatura de 65°C y una presión de 85.3 kPa.
- F. Económicamente, la construcción del reactor continuo agitado presenta la ventaja de que el proceso tiene un mejor control, con lo que se ahorra la considerable cantidad de materiales desperdiciados en las operaciones de varios procesos manuales por lotes. Este ahorro se refleja, en el tiempo de recuperación de la inversión obtenido, que fue de 0.58 años.
- G. El tiempo medio de residencia en el reactor es de 3.6 h, lo cual combinado con la cinética de reacción, es un indicador de la capacidad del reactor de mezclar los reactivos de manera tal, que la reacción puede considerarse completa, al extraer el producto del reactor.
- H. Todo el equipo que entra en contacto directo con los reactivos o productos, se encuentra diseñado de acero inoxidable, para que sea capaz de resistir la corrosividad de los materiales, la característica exotérmica de la reacción y al mismo tiempo la temperatura considerable de operación.
- I. El equipo auxiliar (chaqueta de enfriamiento y reductor de velocidad), se encuentra diseñado de acero al carbón, dado que se busca un material resistente, pero que al mismo tiempo sea beneficioso económicamente.

## X. RECOMENDACIONES

- A. Realizar un estudio del secado de la pasta, que permita incluir la energía extraída del sistema por este medio, y a la vez sea determinante en el sistema de ventilación del reactor continuo agitado.
- B. Realizar cotizaciones con equipos de contratistas, que permitan el confirmar o refutar los costos estimados por el método empleado en el presente estudio.
- C. Antes de proceder a poner en marcha un proyecto de gran magnitud como el propuesto, es necesario que los estudios para diseño de sistemas de agitación y enfriamiento se amplien, a modo que se incluya la experiencia de proveedores expertos en los equipos a emplear.
- D. Desarrollar un estudio sobre el empleo de serpentines de enfriamiento, que podrían resultar ventajosos económicamente y técnicamente, si se colocan de manera que no interfieran con el sistema de agitación.

## XI. BIBLIOGRAFIA

- Fogler Scott. 2001. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. New York, editorial Prentice Hall. 958 págs.
- Hausbrand Erick. 1990. *Das trocknen mit luft und dampf*. 5ª ed. Berlin, Editorial Julius Springer. 348 págs.
- Perry, Robert, *et al.* 2001. *Manual del ingeniero químico*. 7ª ed. Madrid, McGraw Hill. 2514 págs.
- Smith James, *et al.* 2000. *Introducción a la termodinámica en ingeniería química*. 5ª ed. Madrid, McGraw Hill. 857 págs.
- Stadros, Theodor. 1984. *Surfactants*. New York, Academic Press, Harcourt Brace Javanovich editores. 354 págs.
- *Reactors*. 2000. Chemical Engineering Progress. New York. 112 págs.

## XII. APÉNDICES

### Apéndice A: Datos obtenidos para los cálculos analíticos y el diseño de la fórmula a emplear en la neutralización

Tabla No.9: Datos obtenidos para las especificaciones de la base (pasta concentrada de dodecibencensulfonato de sodio) requeridas en plantas de jabones y detergentes

Análisis fisicoquímico	Valor objetivo	Valor máximo permitido	Valor mínimo permitido
Porcentaje de ingrediente activo para la base de detergentes(% m/m)	58.70%	60.40%	57.00%
Porcentaje de ingrediente activo para la base de jabones(% m/m)	50.20%	51.90%	48.50%
Humedad relativa en base seca para la pasta de detergentes(% m/m)	41.3	42.3	40.3
Humedad relativa en base seca para la pasta de jabones(% m/m)	49.8	50.8	48.8
Densidad (g/L)	1300.00	1350.00	1250.00
Viscosidad (Pa s)	5.000	6.500	3.500
pH	12.50	13.50	11.50

Esta tabla se obtiene a partir de las especificaciones de producción de una planta de producción de jabones y detergentes, ubicada en Guatemala C.A.

Tabla No.10: Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la Fórmula No.1, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c

Análisis fisicoquímico efectuado	Peso de pasta utilizado en el análisis (g+/- 0.0001g)	Concentración de la solución empleada para titular (M+/- 8.5%)	Volumen de titulante empleado en el análisis(mL+/- 0.05mL)	Volumen del recipiente empleado en el análisis(mL)	Valor obtenido por medio del medidor utilizado
Ingrediente activo (% m/m)	1.1209	0.005039	36.65	-	-
Humedad relativa en base seca (%m/m+/- 0.01%m/m)	-	-	-	-	43.50%
Densidad de la mezcla (g/L)	6.6012	-	-	5.46	-
pH (+/-0.1)	1.2009	-	-	-	13.0

Tabla No.11: Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la Fórmula No.2, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c

Análisis fisicoquímico efectuado	Peso de Pasta utilizado en el análisis (g+/- 0.0001g)	Concentración de la solución empleada para titular (M+/- 8.5%)	Volumen de Titulante empleado en el análisis (mL+/- 0.05mL)	Volumen del recipiente empleado en el análisis (mL)	Valor obtenido por medio del medidor utilizado
Ingrediente Activo (% m/m)	1.0871	0.005039	36.35	-	-
Humedad relativa en base seca (%m/m+/- 0.01%m/m)	-	-	-	-	42.60%
Densidad de la mezcla (g/L)	6.9509	-	-	5.46	-
pH (+/-0.1)	1.0713	-	-	-	12.8

Tabla No.12: Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la Fórmula No.3, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c

Análisis fisicoquímico efectuado	Peso de Pasta utilizado en el análisis (g+/- 0.0001g)	Concentración de la solución empleada para titular (M+/- 8.5%)	Volumen de Titulante empleado en el análisis (mL+/- 0.05mL)	Volumen del recipiente empleado en el análisis (mL)	Valor obtenido por medio del medidor utilizado
Ingrediente Activo (% m/m)	1.0349	0.005039	35.1	-	-
Humedad relativa en base seca (%m/m+/- 0.01%m/m)	-	-	-	-	41.60%
Densidad de la mezcla (g/L)	7.0569	-	-	5.46	-
pH (+/-0.1)	0.9934	-	-	-	12.5

Tabla No.13: Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la Fórmula No.4, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c

Análisis fisicoquímico efectuado	Peso de Pasta utilizado en el análisis (g+/- 0.0001g)	Concentración de la solución empleada para titular (M+/- 8.5%)	Volumen de Titulante empleado en el análisis (mL+/- 0.05mL)	Volumen del recipiente empleado en el análisis (mL)	Valor obtenido por medio del medidor utilizado
Ingrediente Activo (% m/m)	1.1206	0.005039	38.75	-	-
Humedad relativa en base seca (%m/m+/- 0.01%m/m)	-	-	-	-	40.70%
Densidad de la mezcla (g/L)	7.2938	-	-	5.46	-
pH (+/-0.1)	0.9881	-	-	-	12.1

Tabla No.14: Datos obtenidos para los análisis fisicoquímicos realizados sobre la pasta producida con la Fórmula No.5, por medio de la balanza de humedad Ohaus MB-200 y del medidor de pH Fisher-Scientific modelo 800c

Análisis fisicoquímico efectuado	Peso de Pasta utilizado en el análisis (g+/- 0.0001g)	Concentración de la solución empleada para titular (M+/- 8.5%)	Volumen de Titulante empleado en el análisis (mL+/- 0.05mL)	Volumen del recipiente empleado en el análisis (mL)	Valor obtenido por medio del medidor utilizado
Ingrediente Activo (% m/m)	1.0821	0.005039	37.85	-	-
Humedad relativa en base seca (%m/m+/- 0.01%m/m)	-	-	-	-	39.70%
Densidad de la mezcla (g/L)	7.3804	-	-	5.46	-
pH (+/-0.1)	1.0086	-	-	-	11.9

Tabla No.15: Datos obtenidos para la viscosidad de la pasta producida con la Fórmula No. 3 en función de la temperatura, por medio del viscosímetro GE modelo L-250

Temperatura de la muestra de dodecilsulfonato de sodio en solución al 58.7% (°C+/- 0.05°C)	Viscosidad (cP +/- 0.5 cP)
45.10	4152
50.05	4250
55.35	4632
60.15	4829
65.25	4951
69.95	5312
75.35	5461
80.05	5617

## Apéndice B: Datos obtenidos para la experimentación en el laboratorio

Tabla No.16: Datos obtenidos para los pesos de agua, soda caústica al 50% (m/m), ácido sulfónico lineal y dodecilsulfonato de sodio al 58.7% (m/m), utilizados en las pruebas realizadas en el sistema de la figura No.17, esto por medio de la balanza Sartorius modelo 8164

Compuesto a utilizar	Masa de agua empleada en la determinación de la capacidad calorífica (g+/-0.1g)	Masa del compuesto empleada en la determinación de la capacidad calorífica(g+/-0.1g)
Ácido sulfónico	1000.1	100.0
Sulfonato de sodio al 58.7% (m/m)	1000.0	99.9
Soda caústica al 50%	1000.0	150.1

Referirse al Apéndice D para mayor detalle del sistema empleado

Tabla No.17: Datos obtenidos para la capacidad calorífica específica del agua en función de la temperatura (Perry R. 1997)

Temperatura del agua	Capacidad calorífica específica del agua (J/(g °C))
25.0	4.18000
27.5	4.17950
30.0	4.17900
32.5	4.17870
35.0	4.17860
37.5	4.17860
40.0	4.17880
42.5	4.17920
45.0	4.17960
47.5	4.18010
50.0	4.18080
52.5	4.18170
55.0	4.18250
57.5	4.18350
60.0	4.18460
62.5	4.18580
65.0	4.18710
67.5	4.18850
70.0	4.19000
72.5	4.19160
75.0	4.19320
77.5	4.19500
80.0	4.19690
82.5	4.19890
85.0	4.20110
87.5	4.20330
90.0	4.20560

Tabla No.18: Datos obtenidos para la temperatura del agua empleada en el sistema de la figura No.17 en función de la temperatura del Ácido dodecibencensulfónico Lineal, para la determinación de la capacidad calorífica específica del ácido

Temperatura del agua (°C+/-0.1°C)	Temperatura del Ácido sulfónico(°C+/-0.1°C)
24.5	25.0
23.9	27.5
23.2	30.0
22.7	32.5
22.2	35.0
21.6	37.5
20.9	40.0
20.3	42.5
19.5	45.0
18.7	47.5
18.0	50.0
17.1	52.5
16.3	55.0
15.5	57.5
14.6	60.0
13.8	62.5
12.9	65.0
12.2	67.5
11.4	70.0
10.5	72.5
9.6	75.0
8.6	77.5
7.7	80.0
6.8	82.5
5.8	85.0
4.9	87.5
3.9	90.0

Referirse al Apéndice D para mayor detalle del sistema empleado

Tabla No.19: Datos obtenidos para la temperatura del agua empleada en el sistema de la figura No.17 en función de la temperatura del dodecibencensulfonato de sodio, para la determinación de la capacidad calorífica específica de la sal en solución

Temperatura del agua (°C+/-0.1°C)	Temperatura del sulfonato de sodio(°C+/-0.1°C)
16.7	25.0
15.6	27.5
14.4	30.0
13.4	32.5
12.2	35.0
11.1	37.5
9.9	40.0
8.6	42.5
7.3	45.0
6.1	47.5
4.8	50.0
27.4	52.5
26.0	55.0
24.5	57.5
23.1	60.0
21.6	62.5
20.1	65.0
18.7	67.5
17.1	70.0
15.6	72.5
14.0	75.0
12.4	77.5
10.9	80.0
9.3	82.5
7.7	85.0
6.2	87.5
4.6	90.0

Referirse al Apéndice D para mayor detalle del sistema empleado

Tabla No.20: Datos obtenidos para la temperatura del agua empleada en el sistema de la figura No.17 en función de la temperatura de la soda caústica al 50% (m/m), para la determinación de la capacidad calorífica específica de la base en solución

Temperatura del agua (°C+/-0.1°C)	Temperatura del sulfonato de sodio(°C+/-0.1°C)
20.0	25.0
19.6	27.5
19.1	30.0
18.6	32.5
18.2	35.0
17.7	37.5
17.2	40.0
16.7	42.5
16.2	45.0
15.6	47.5
15.1	50.0
14.5	52.5
14.0	55.0
13.4	57.5
12.8	60.0
12.2	62.5
11.7	65.0
11.1	67.5
10.5	70.0
9.8	72.5
9.2	75.0
8.5	77.5
7.8	80.0
7.1	82.5
6.5	85.0
5.8	87.5
5.1	90.0

Referirse al Apéndice D para mayor detalle del sistema empleado

Tabla No.21: Datos obtenidos para el cálculo de la entalpía o calor de disolución de la soda caústica al 50% (m/m) en agua tratada, esto por medio de la balanza Sartorius modelo 8164

No. de Corrida	Temperatura inicial de las soluciones (°C+/-0.1°C)	Temperatura máxima alcanzada por la solución de NaOH(°C+/-0.1°C)	Masa de agua empleada en la disolución de la soda caústica (g+/-0.1g)	Masa de soda caústica al 50% agregada (g+/- 0.1g)
1	23.1	44.9	12.0	5.4
2	23.4	45.6	12.0	
3	22.9	44.2	12.0	
4	23.3	47.3	20.0	9.0
5	23.4	48.1	20.0	
6	23.3	44.8	20.0	
7	24.1	46.6	30.0	13.5
8	23.4	49.2	30.0	
9	22.5	45.6	30.0	
10	23.0	46.8	50.0	22.6
11	23.2	48.9	50.0	
12	23.8	50.1	50.0	

Referirse al Apéndice D para mayor detalle del sistema empleado

Tabla No.22: Datos obtenidos para el cálculo de la entalpía de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico con soda cáustica diluida al 15.6% (m/m), esto por medio de la balanza Sartorius modelo 8164

No. de Corrida	Temperatura inicial de las soluciones (°C+/-0.1°C)	Temperatura máxima alcanzada por la solución de sulfonato de sodio(°C+/-0.1°C)	Masa de soda cáustica diluida empleada en la reacción (g+/-0.1g)	Masa de ácido sulfónico Lineal agregado (g+/-0.1g)
1	37.5	73.1	10.0	12.2
2	37.2	72.0	10.0	12.2
3	37.4	72.9	10.0	12.2
4	38.0	69.9	15.0	18.3
5	37.2	74.1	15.0	18.3
6	38.4	73.7	15.0	18.3
7	37.3	80.2	20.0	24.4
8	37.3	75.5	20.0	24.4
9	37.4	72.7	20.0	24.4
10	38.1	77.6	25.0	30.6
11	36.2	80.9	25.0	30.6
12	36.3	74.4	25.0	30.6

Tabla No.23: Datos obtenidos para las condiciones de operación de las corridas realizadas en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico, por medio de la balanza Sartorius modelo 8164

No. De Corrida	Volumen de Pasta Empleado en el reactor (L+/-0.05L)	Masa agregada de soda disuelta al 15.6%(m/m) (g+/-0.1g)	Masa agregada de Ácido Sulfónico (g+/-0.1g)
1	2.00	4.1	5.0
2	2.00	8.2	10.0
3	2.00	16.4	20.0
4	2.00	40.9	50.0
5	2.00	81.8	100.0

Tabla No.24: Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la primera corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico

No. De Corrida	Tiempo de la corrida (s+/-0.1s)	Temperatura de la muestra en el tiempo especificado (°C+/-0.01°C)
1	0.0	65.12
	1.0	65.13
	2.0	65.20
	3.0	65.23
	4.0	65.24
	5.0	65.25
	6.0	65.25
	10.0	65.26
	15.0	65.26
	20.0	65.26
	25.0	65.27
	30.0	65.27
	40.0	65.27
60.0	65.27	
90.0	65.27	

Tabla No.25: Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la segunda corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecibencensulfónico

No. De Corrida	Tiempo de la corrida (s $\pm$ 0.1s)	Temperatura de la muestra en el tiempo especificado ( $^{\circ}$ C $\pm$ 0.01 $^{\circ}$ C)
2	0.0	64.55
	1.0	64.56
	2.0	64.72
	3.0	64.79
	4.0	64.81
	5.0	64.82
	6.0	64.83
	10.0	64.84
	15.0	64.85
	20.0	64.85
	25.0	64.85
	30.0	64.86
	40.0	64.86
	60.0	64.86
90.0	64.86	

Tabla No.26: Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la tercera corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecibencensulfónico

No. De Corrida	Tiempo de la corrida (s $\pm$ 0.1s)	Temperatura de la muestra en el tiempo especificado ( $^{\circ}$ C $\pm$ 0.01 $^{\circ}$ C)
3	0.0	66.38
	1.0	66.38
	2.0	66.74
	3.0	66.88
	4.0	66.92
	5.0	66.95
	6.0	66.97
	10.0	66.98
	15.0	66.99
	20.0	67.00
	25.0	67.00
	30.0	67.01
	40.0	67.01
	60.0	67.01
90.0	67.01	

Tabla No.27: Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la cuarta corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecibencensulfónico

No. De Corrida	Tiempo de la corrida (s $\pm$ 0.1s)	Temperatura de la muestra en el tiempo especificado ( $^{\circ}$ C $\pm$ 0.01 $^{\circ}$ C)
4	0.0	65.49
	1.0	66.40
	2.0	66.77
	3.0	66.93
	4.0	66.98
	5.0	67.01
	6.0	67.02
	10.0	67.03
	15.0	67.03
	20.0	67.04
	25.0	67.04
	30.0	67.04
	40.0	67.04
	60.0	67.04
90.0	67.04	

Tabla No.28: Datos obtenidos para la distribución de temperaturas con el tiempo, obtenida en la quinta corrida realizada en la determinación de la cinética de la reacción de neutralización del ácido dodecibencensulfónico

No. De Corrida	Tiempo de la corrida (s $\pm$ 0.1s)	Temperatura de la muestra en el tiempo especificado ( $^{\circ}$ C $\pm$ 0.01 $^{\circ}$ C)
5	0.0	63.97
	1.0	65.62
	2.0	66.38
	3.0	66.75
	4.0	66.92
	5.0	66.97
	6.0	67.00
	10.0	67.03
	15.0	67.05
	20.0	67.06
	25.0	67.07
	30.0	67.07
	40.0	67.07
	60.0	67.07
90.0	67.07	

## Apéndice C: Datos obtenidos para el diseño del equipo y para los costos de producción e inversión necesaria en maquinaria y equipo

Tabla No.29: Datos obtenidos para el diseño del reactor de neutralización del ácido dodecibencensulfónico con soda cáustica

Flujo de salida necesario en el reactor de neutralización (kg/h)	Altura de las láminas disponibles de Acero Inoxidable (m)	Ancho de las láminas disponibles de Acero Inoxidable (m)
2900	1.83	6.10
Diámetro de los soportes verticales a colocar (m)	Carga máxima de compresión de los soportes a colocar (kg)	Precio de compra total de los soportes
0.20	35000	Q 27,400.00

Tabla No.30: Datos obtenidos para la estimación de los beneficios económicos obtenidos con la instalación del reactor de neutralización del ácido dodecibencensulfónico

Cantidad media extra de soda empleada en la producción actual (kg/mes)	Cantidad media extra de Ácido Sulfónico empleado en la producción actual (kg/mes)	Varaciones de materiales de postadición en la producción actual (kg/mes)	Cantidad de producción rechazada en la operación actual (kg/mes)
7750	6150	3650	10000
Costo unitario de la soda cáustica al 50% (Q/kg)	Costo unitario del ácido sulfónico (Q/kg)	Costo unitario promedio de la producción del sulfonato de sodio(Q /kg)	Costo unitario del tratamiento para desechar la producción rechazada (Q /kg)
2.59	7.23	6.32	16.25

Tabla No.31: Datos obtenidos para los costos de las horas hombre de los diferentes niveles de operador, así como para la cantidad de operadores empleados en el proceso actual, y con el empleo del reactor continuo agitado

Nivel del Operador	Descripción	Costo promedio de la hora hombre	Número de operadores empleados con el proceso actual por turno	Número de operadores empleados con el uso del reactor por turno
1/2	Limpieza	Q 7.67	5	2
1	Empacador	Q 11.36	40	40
2	Auxiliar	Q 19.32	12	4
3	Operador	Q 22.73	9	2
4	Mecánico	Q 25.57	4	2

Apéndice D: Diagramas de los sistemas empleados en el laboratorio y del equipo diseñado para neutralización del ácido dodecilbencensulfónico

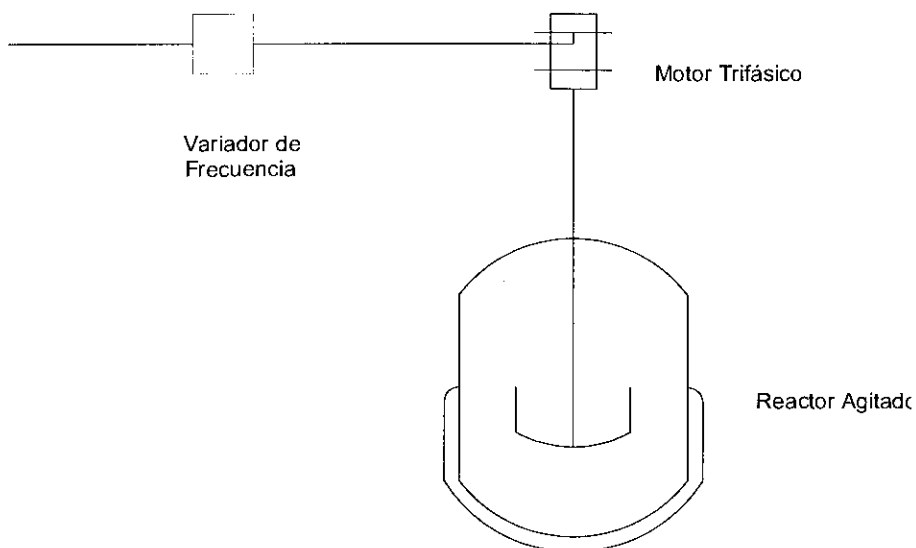


Figura No. 16: Diagrama del sistema de control de agitación del reactor continuo agitado empleado en la neutralización del ácido dodecilbencensulfónico (sin escala)

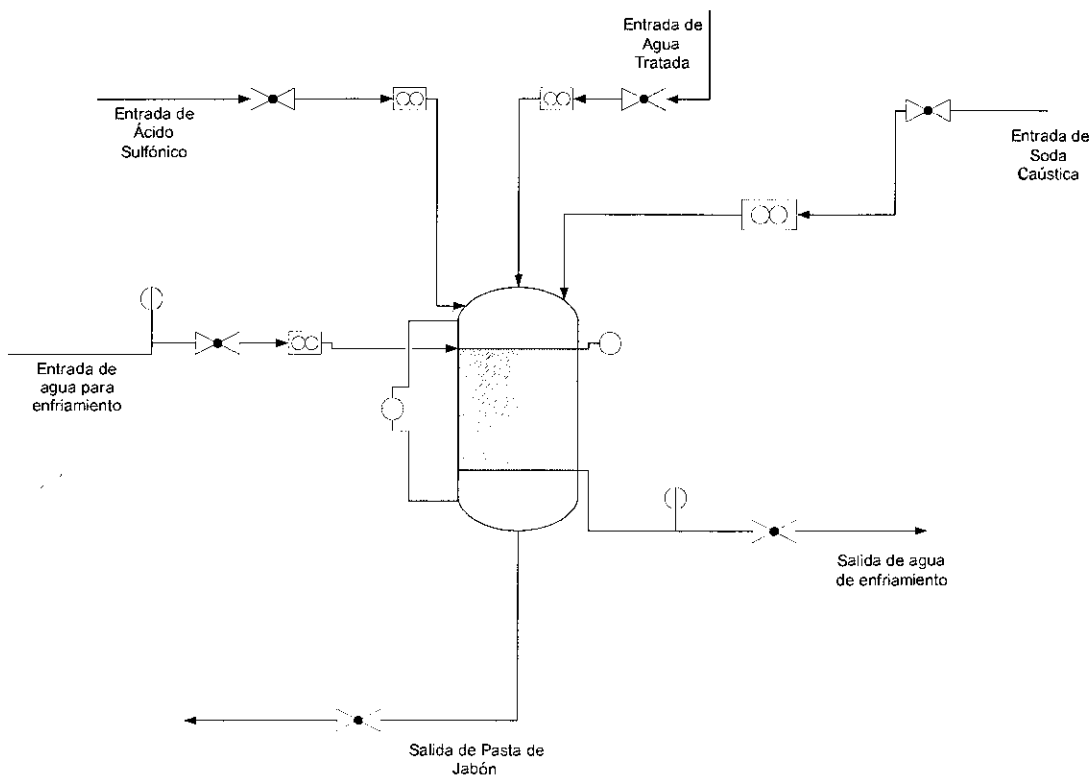


Figura No. 17: Diagrama del sistema de control del reactor continuo agitado empleado en la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico (sin escala)

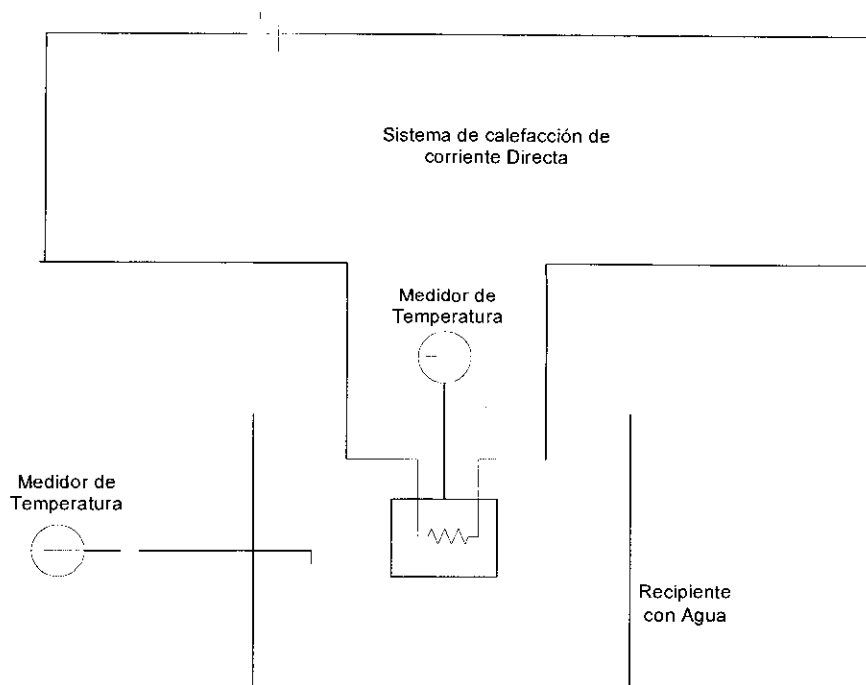


Figura No. 18: Diagrama del sistema utilizado en la determinación de la capacidad calorífica específica de las sustancias empleadas en la formulación (sin escala)

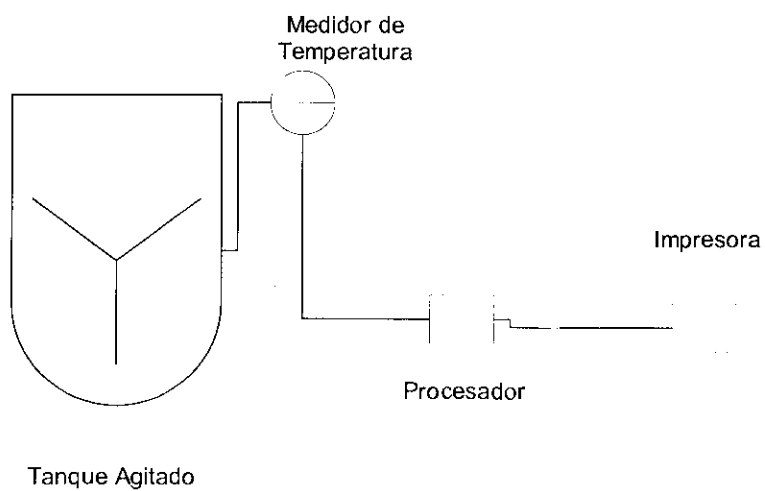


Figura No. 19: Diagrama del sistema utilizado en el laboratorio para la determinación de los calores estándar de reacción y de la cinética de la neutralización (sin escala)

## Apéndice E: Datos calculados para la obtención de las posibles fórmulas a utilizar en el reactor de neutralización

Tabla No.32: Datos calculados para obtención de las fórmulas propuestas a emplear en la neutralización del ácido dodecibencensulfónico con soda cáustica

Material a utilizar	Porcentaje del material a emplear en la Fórmula propuesta 1	Porcentaje del material a emplear en la Fórmula propuesta 2	Porcentaje del material a emplear en la Fórmula propuesta 3	Porcentaje del material a emplear en la Fórmula propuesta 4	Porcentaje del material a emplear en la Fórmula propuesta 5
Agua tratada	33.0%	32.0%	31.0%	30.0%	29.0%
Soda Caústica al 50% (m/m)	14.0%	14.0%	14.0%	14.0%	14.0%
Ácido Sulfónico Lineal al 96.5% (m/m)	53.0%	54.0%	55.0%	56.0%	57.0%

Tabla No.33: Datos calculados para los resultados de los análisis fisicoquímicos obtenidos a partir de cada una de las fórmulas propuestas

Análisis Realizado	Resultado analítico obtenido a partir de la Fórmula propuesta 1	Resultado analítico obtenido a partir de la Fórmula propuesta 2	Resultado analítico obtenido a partir de la Fórmula propuesta 3	Resultado analítico obtenido a partir de la Fórmula propuesta 4	Resultado analítico obtenido a partir de la Fórmula propuesta 5
Ingrediente Activo (% m/m)	56.51%	57.79%	58.62%	59.77%	60.46%
Humedad relativa en base seca (%m/m+/- 0.01%m/m)	43.50%	42.60%	41.60%	40.70%	39.70%
Densidad de la mezcla (g/L)	1209.0	1273.1	1292.5	1335.9	1351.7
pH (+/-0.1)	13	12.8	12.5	12.1	11.9

Tabla No.34: Datos calculados para obtención de la viscosidad de la pasta fabricada a partir de la fórmula propuesta No.3, en función de la temperatura

Temperatura de la muestra de dodecibencensulfonato de sodio en solución al 58.7% (°C+/-0.05°C)	Viscosidad (cP +/- 0.5cP)	Viscosidad (Pa s +/- 5x10 <sup>-4</sup> Pa s)
45.10	4152	4.152
50.05	4250	4.250
55.35	4632	4.632
60.15	4829	4.829
65.25	4951	4.951
69.95	5312	5.312
75.35	5461	5.461
80.05	5617	5.617

Apéndice F: Datos calculados y gráficas empleadas para la obtención de los calores específicos de reacción y disolución, y las capacidades caloríficas específicas de cada uno de los compuestos utilizados

Tabla No.35: Datos calculados para la obtención de la capacidad calorífica específica del ácido dodecilbencensulfónico en función de la temperatura

Temperatura del agua (°C±0.1°C)	Capacidad calorífica específica del agua a la temperatura especificada (J/(g °C)±0.02J/(g °C))	Capacidad calorífica específica del ácido Sulfónico (J/(g °C))	Incertidumbre (J/(g °C))
24.5	4.1788	10.03	0.041
23.9	4.1786	11.70	0.049
23.2	4.1784	8.36	0.036
22.7	4.1783	8.36	0.037
22.2	4.1781	10.03	0.045
21.6	4.1779	11.70	0.054
20.9	4.1777	10.03	0.048
20.3	4.1776	13.37	0.066
19.5	4.1774	13.37	0.069
18.7	4.1772	11.70	0.063
18.0	4.1770	15.04	0.084
17.1	4.1768	13.37	0.078
16.3	4.1766	13.37	0.082
15.5	4.1765	15.04	0.097
14.6	4.1763	13.37	0.092
13.8	4.1762	15.04	0.109
12.9	4.1760	11.69	0.091
12.2	4.1759	13.36	0.110
11.4	4.1758	15.03	0.132
10.5	4.1757	15.03	0.143
9.6	4.1756	16.70	0.174
8.6	4.1755	15.03	0.175
7.7	4.1755	15.03	0.195
6.8	4.1754	16.70	0.246
5.8	4.1754	15.03	0.259
4.9	4.1753	16.70	0.341
3.9	4.1753		

Tabla No.36: Datos calculados para la obtención de la capacidad calorífica específica del dodecilbencensulfonato de sodio en función de la temperatura

Temperatura del agua (°C±0.1°C)	Capacidad calorífica específica del agua a la temperatura especificada (J/(g °C)±0.02J/(g °C))	Capacidad calorífica específica del Sulfonato de Sodio (J/(g °C))	Incertidumbre (J/(g °C))
16.7	4.1788	18.39	0.110
15.6	4.1785	20.06	0.129
14.4	4.1781	16.71	0.116
13.4	4.1778	20.05	0.150
12.2	4.1775	18.38	0.151
11.1	4.1772	20.05	0.181
9.9	4.1769	21.72	0.219
8.6	4.1767	21.72	0.253
7.3	4.1764	20.05	0.275
6.1	4.1762	21.72	0.356
4.8	4.1760	23.39	0.487
27.4	4.1758	23.38	0.085
26.0	4.1756	25.05	0.096
24.5	4.1755	23.38	0.095
23.1	4.1754	25.05	0.108
21.6	4.1754	25.05	0.116
20.1	4.1753	23.38	0.116
18.7	4.1753	26.72	0.143
17.1	4.1753	25.05	0.147
15.6	4.1754	26.72	0.171
14.0	4.1755	26.72	0.191
12.4	4.1756	25.05	0.202
10.9	4.1758	26.73	0.245
9.3	4.1760	26.73	0.287
7.7	4.1762	25.06	0.325
6.2	4.1765	26.73	0.431
4.6	4.1768		

Tabla No.37: Datos calculados para la obtención de la capacidad calorífica específica de la soda cáustica al 50%(m/m) en función de la temperatura

Temperatura del agua (°C±0.1°C)	Capacidad calorífica específica del agua a la temperatura especificada (J/(g °C)±0.02J/(g °C))	Capacidad calorífica específica del Sulfonato de Sodio (J/(g °C))	Incertidumbre (J/(g °C))
20.0	4.1788	4.45	0.022
19.6	4.1787	5.57	0.028
19.1	4.1785	5.57	0.029
18.6	4.1784	4.45	0.024
18.2	4.1783	5.57	0.031
17.7	4.1781	5.57	0.031
17.2	4.1780	5.57	0.032
16.7	4.1778	5.57	0.033
16.2	4.1777	6.68	0.041
15.6	4.1775	5.57	0.036
15.1	4.1774	6.68	0.044
14.5	4.1772	5.57	0.038
14.0	4.1771	6.68	0.048
13.4	4.1770	6.68	0.050
12.8	4.1768	6.68	0.052
12.2	4.1767	5.57	0.046
11.7	4.1766	6.68	0.057
11.1	4.1765	6.68	0.060
10.5	4.1764	7.79	0.074
9.8	4.1763	6.68	0.068
9.2	4.1762	7.79	0.085
8.5	4.1760	7.79	0.092
7.8	4.1759	7.79	0.100
7.1	4.1759	6.68	0.094
6.5	4.1758	7.79	0.120
5.8	4.1757	7.79	0.134
5.1	4.1756		

Tabla No.38: Datos calculados para la obtención del calor estándar de disolución de la soda cáustica al 50%(m/m) en agua tratada

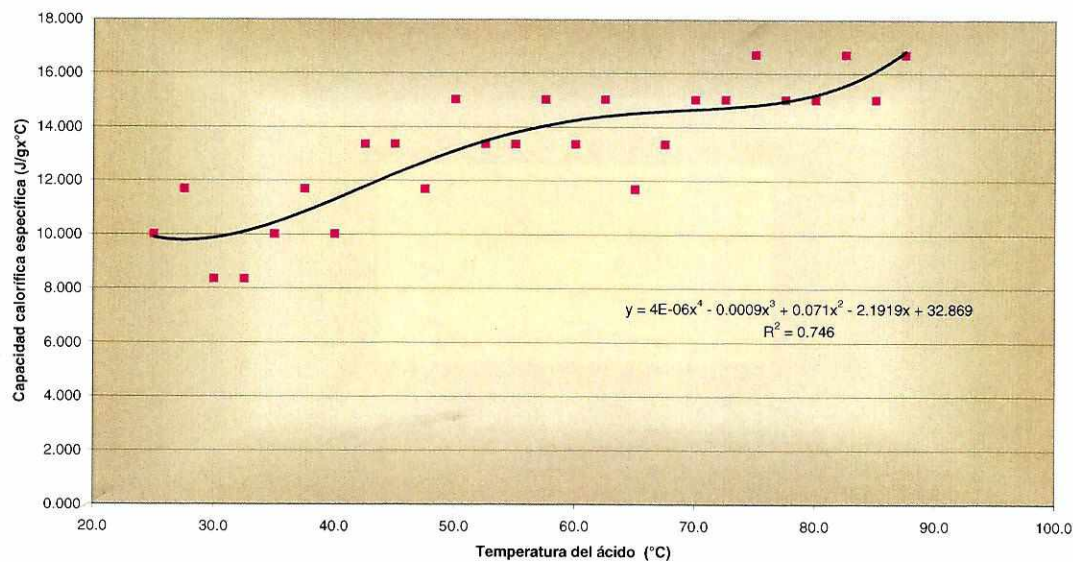
No. de Corrida	Temperatura Promedio trabajada en la corrida (°C±0.1°C)	Concentración final de soda en la solución (%m/m±0.75m/m)	Capacidad calorífica específica de la solución obtenida (kJ/(kg K))	Entalpía de disolución (kJ/mol)	Incertidumbre (kJ/mol)
1	34.0	15.56%	4.609	-9.4	0.451
2	34.5			-9.5	0.460
3	33.6			-9.2	0.441
4	35.3		4.609	-10.3	0.497
5	35.8			-10.6	0.512
6	34.1			-9.2	0.445
7	35.4		4.609	-9.7	0.466
8	36.3			-11.1	0.534
9	34.1			-9.9	0.478
10	34.9		4.609	-10.2	0.493
11	36.1			-11.0	0.532
12	37.0			-11.3	0.545
Promedio	35.1	-	-	-10.1	-
Incertidumbre	0.603	-	-	0.429	-

Tabla No.39: Datos calculados para la obtención del calor estándar de la reacción de neutralización del ácido dodecilsulfónico

No. de Corrida	Temperatura Promedio trabajada en la corrida (°C+/- 0.1°C)	Capacidad calorífica específica de la solución obtenida (kJ/(kg K))	Entalpía de reacción (kJ/mol)	Incertidumbre (kJ/mol)
1	55.3	21.03	-438.3	5.61
2	54.6	20.26	-412.9	5.29
3	55.2	21.72	-451.4	5.78
4	54.0	20.84	-389.2	4.98
5	55.7	21.72	-469.2	6.01
6	56.1	22.02	-455.1	5.83
7	58.8	21.03	-528.1	6.76
8	56.4	22.02	-492.5	6.31
9	55.1	21.72	-448.9	5.75
10	57.9	23.03	-532.6	6.82
11	58.6	23.03	-602.7	7.72
12	55.4	21.72	-484.5	6.20
Promedio	56.1	-	-475.4	-
Incertidumbre	0.877	-	32.861	-

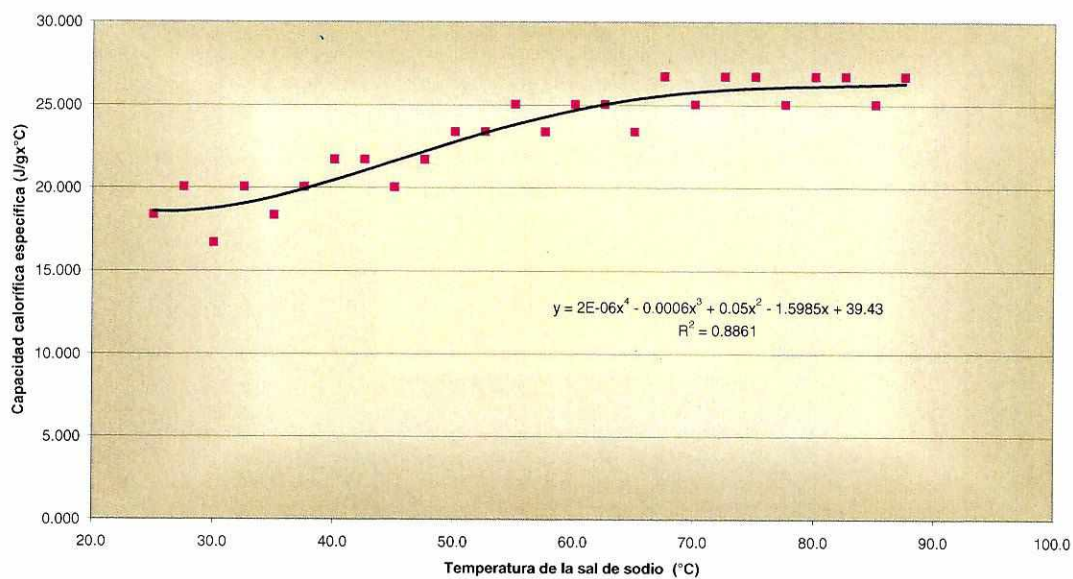
Gráfica No 1:

Capacidad calorífica del ácido dodecilsulfónico con respecto a la temperatura de trabajo



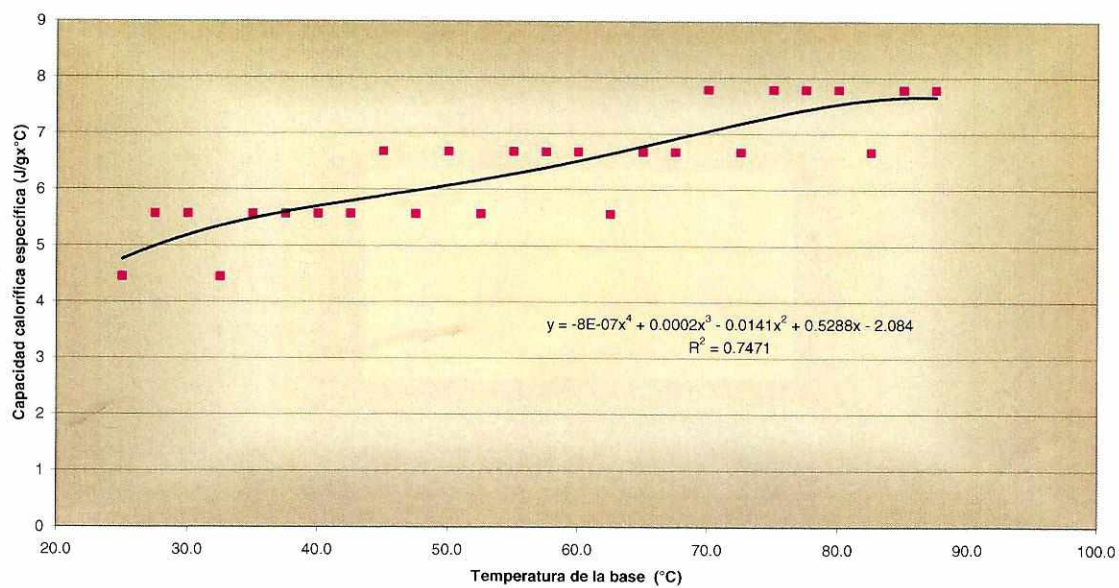
Gráfica No 2:

Capacidad calorífica del dodecilsulfonato de sodio con respecto a la temperatura de trabajo



Gráfica No 3:

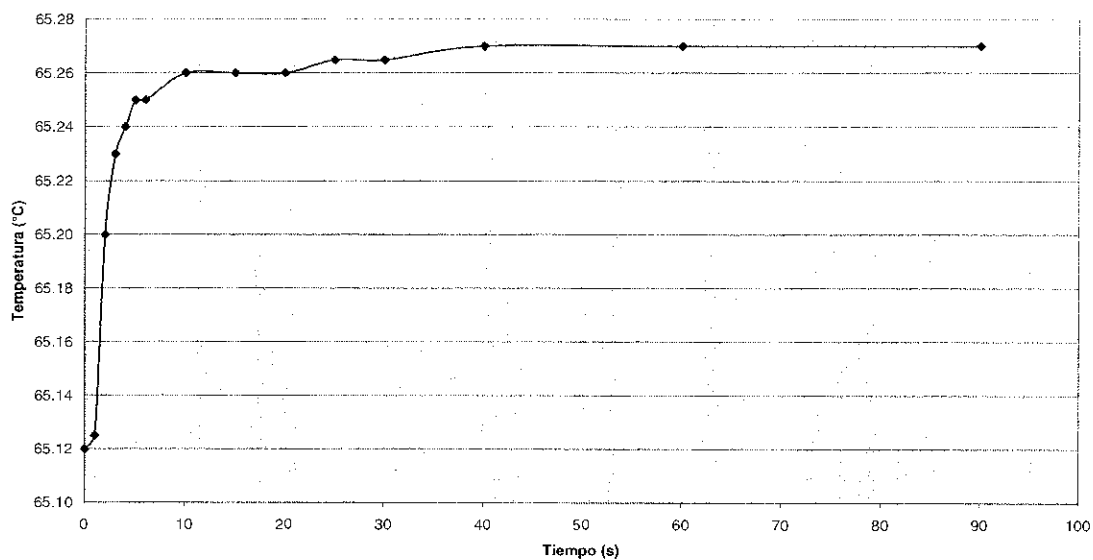
Capacidad calorífica de la soda cáustica al 50% (p/p) con respecto a la temperatura de trabajo



Apéndice G: Datos calculados y gráficas empleadas para la obtención de la cinética aparente de la reacción de neutralización del ácido dodecibencensulfónico

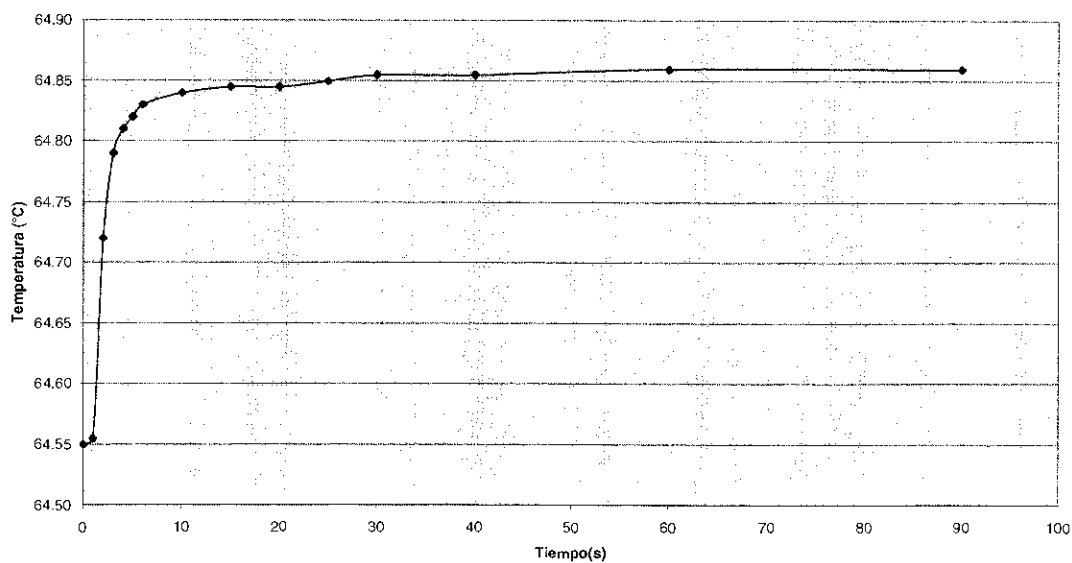
Gráfica No 4:

Distribución de Temperatura con el tiempo para la primera corrida Realizada en la determinación de la cinética de Reacción



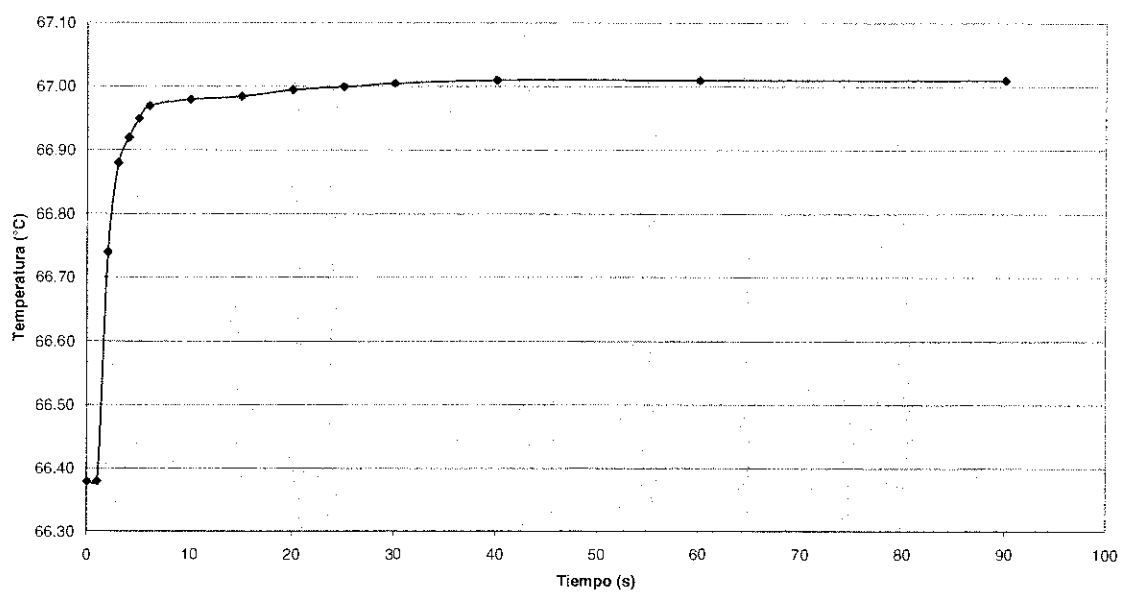
Gráfica No 5:

Distribución de Temperatura con el tiempo para la segunda corrida Realizada en la determinación de la cinética de Reacción



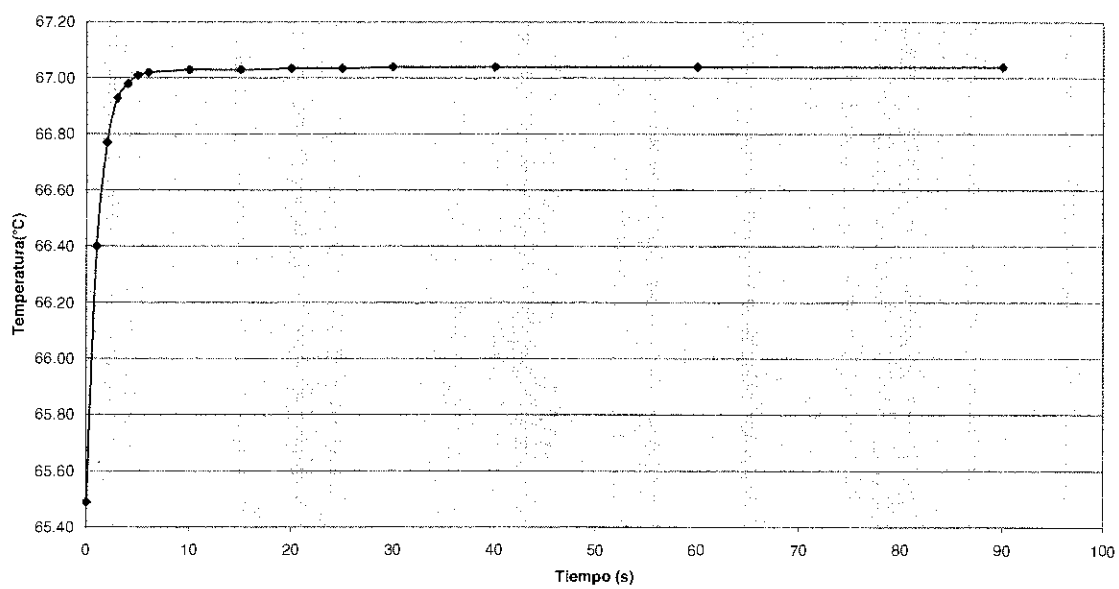
Gráfica No 6:

Distribución de Temperatura con el tiempo para la tercera corrida Realizada en la determinación de la cinética de Reacción



Gráfica No 7:

Distribución de Temperatura con el tiempo para la cuarta corrida Realizada en la determinación de la cinética de Reacción



Gráfica No 8:

Distribución de Temperatura con el tiempo para la Quinta corrida Realizada en la determinación de la cinética de Reacción

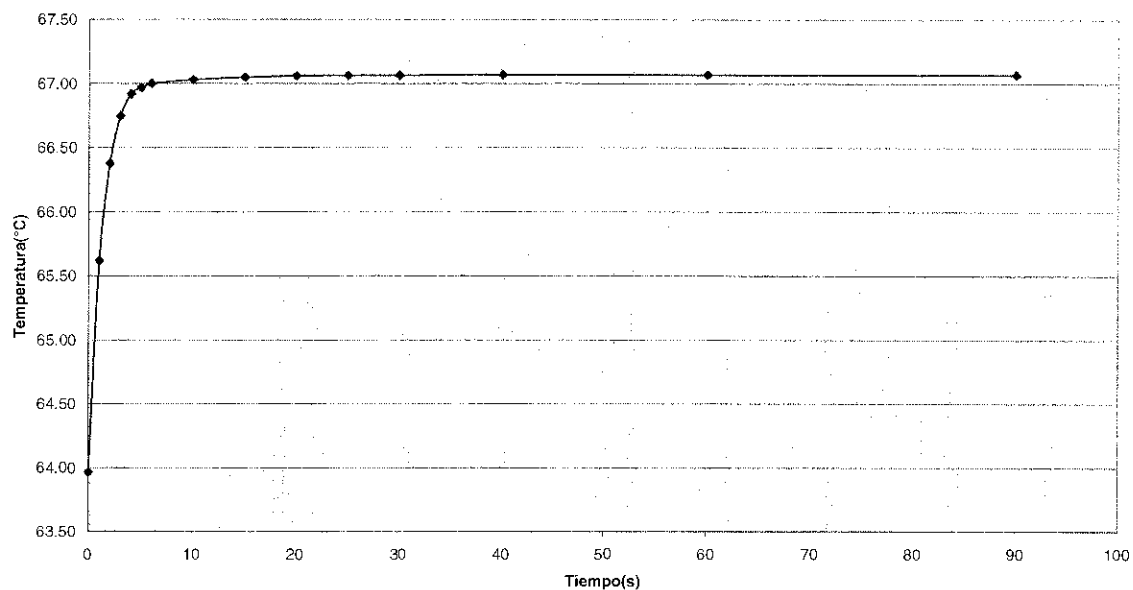


Tabla No.40: Datos calculados para la obtención de los parámetros a graficar en el método de las velocidades iniciales de reacción

No. de corrida	Cambio de la temperatura con el tiempo en el inicio de la reacción	Concentración inicial de ácido sulfónico en la solución(M)	Concentración inicial de soda caústica en la solución (M)	Cambio de concentración inicial con el tiempo	logaritmo natural del cambio de concentración inicial con el tiempo	Logaritmo natural de la concentración inicial de ácido sulfónico en la solución
1	0.08	0.00749	0.00795	0.00479	-5.34	-4.83
2	0.16	0.01498	0.01591	0.01055	-4.55	-4.14
3	0.36	0.02997	0.03182	0.02302	-3.77	-3.45
4	0.91	0.07492	0.07955	0.05818	-2.84	-2.53
5	1.65	0.14984	0.15909	0.10549	-2.25	-1.84

Gráfica No 9:

Gráfica logarítmica de la velocidad de reacción contra la concentración inicial

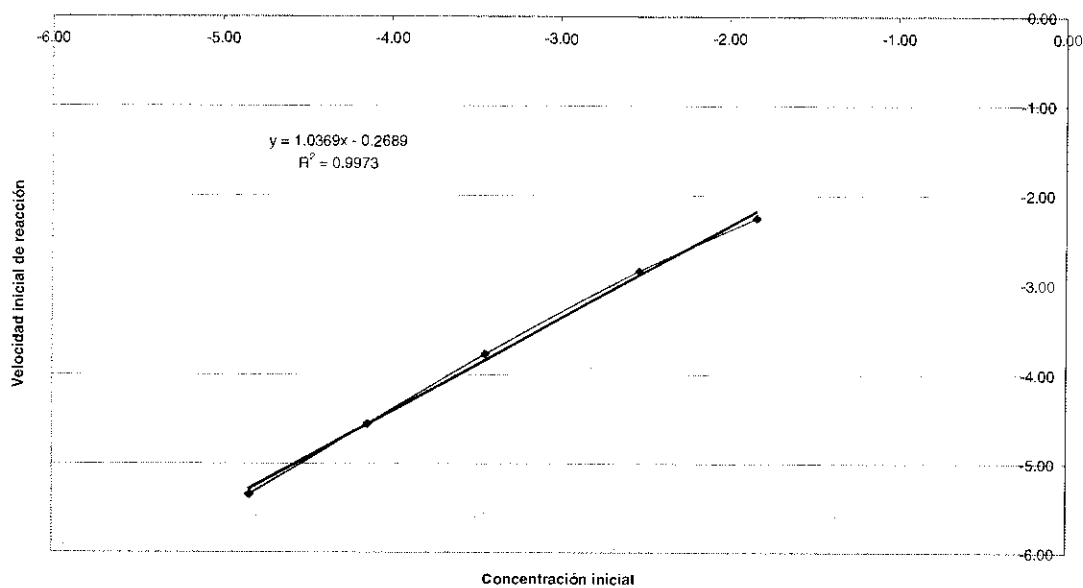


Tabla No.41: Datos calculados para la obtención de la ecuación que relaciona la velocidad de reacción con la concentración de ácido sulfónico en solución

Ecuación obtenida por medio del método de las velocidades iniciales de reacción	$\ln(dC_A/dt) = 1.0369 \times \ln(C_A) - 0.2689$
Coefficiente de correlación de la ecuación obtenida	0.9973
Orden de la reacción con respecto a la concentración de ácido sulfónico	1.037
logaritmo natural de la constante de proporcionalidad de la ecuación de velocidad	-0.269
Constante de proporcionalidad de la ecuación de velocidad	0.764

## Apéndice H: Datos calculados y especificaciones de diseño de la maquinaria y equipo utilizados en la neutralización del ácido sulfónico

Tabla No.42: Datos calculados para el diseño inicial del reactor continuo agitado a construir

Flujo de salida de Pasta necesario(kg/s)	Flujo de entrada de ácido necesario (kg/s)	Flujo molar de entrada de ácido necesario (mol/s)	Conversión de ácido sulfónico en el reactor	Volumen necesario del reactor continuo agitado(m <sup>3</sup> )	Temperatura de operación (°C)
0.806	0.443	1.376	99.99%	8.108	65.0
Relaciones altura/diámetro aconsejadas	Relación altura/diámetro inicial escogida	Diámetro del reactor (m)	Altura del reactor (m)	Tiempo medio de residencia en el reactor (h)	
1 - 1.5	1.320	1.985	2.620	3.6	

Tabla No.43: Datos calculados para el diseño del reactor continuo agitado a construir con las consideraciones necesarias de materiales de construcción

Altura de las láminas disponibles para el diseño del reactor (m)	Ancho de las láminas disponibles para el diseño del reactor (m)	Área con que se cuenta por medio de tres placas de acero (m <sup>2</sup> )	Ancho de las placas necesarias para la construcción del reactor (m)	Diámetro del reactor empleando los tamaños de placa disponibles (m)
1.829	6.096	33.442	6.236	1.940
Volumen de las secciones semiesféricas a construir (m <sup>3</sup> )	Volumen de la sección cilíndrica a construir (m <sup>3</sup> )	Volumen total disponible en el reactor (m <sup>3</sup> )	Altura en la que el líquido se encontrará en la sección cilíndrica del reactor (m)	Relación altura/diámetro final
1.912	7.747	11.572	2.095	1.350
Carga máxima en el reactor (kg)	Presión en el fondo del reactor (kPa)	Fuerza aplicada en el fondo del reactor (N)	Compresión que soporta una placa de acero inoxidable de rolado en frío (kPa)	Grosor de la placa (m)
10945.21	53.44	107372.55	1350.00	0.00318
Grosor de las placas disponibles (m)	Flujo estimado de vapor (kg/s)	Volumen específico del vapor a presión atmosférica (m <sup>3</sup> /kg)	Diámetro del espacio de venteo (m)	Velocidad del vapor de salida (m/s)
0.00635	0.00836	1.673	0.09702	1.891

Tabla No.44: Datos calculados para el diseño del sistema de agitación del reactor de neutralización del ácido sulfónico lineal

Número de placas deflectoras verticales necesarias	Ancho necesario de las placas deflectoras (m)	Separación entre las placas deflectoras y la pared del reactor (m)	Diámetro de la turbina (m)	Tipo de impulsor
4	0.162	0.081	1.164	6 Placas inclinadas a 45°
	Altura de las paletas del agitador(m)	Velocidad de giro del agitador (rpm)	Número de Reynolds en condiciones extremas	
	0.146	140	1219.81	
Número de potencia	Potencia necesaria (kW)	Potencia necesaria (hP)	Potencia del motor necesaria (hP)	Potencia necesaria del motor (kW)
1.50	55.01	73.75	100.00	74.60

Tabla No.45: Datos calculados para el diseño del sistema de enfriamiento del reactor continuo agitado

Número de Reynolds	Número de Prandtl	Conductividad de la pasta (W/m K)	Factor "a" de la ecuación adimensional de transferencia de calor	Factor "b" de la ecuación adimensional de transferencia de calor
1219.81	12.62	10.70	0.540	0.667
Factor "m" de la ecuación adimensional de transferencia de calor	Número de Nusselt	Coefficiente de transferencia de masa (W/m <sup>2</sup> K)	Temperatura de entrada a la chaqueta (°C)	Temperatura de Salida de la chaqueta (°C)
0.140	136.53	752.89	16.0	20.0
Flujo de calor producido a partir de las reacciones (kW)	Área de transferencia de calor en el reactor(m <sup>2</sup> )	Diferencia de temperaturas entre la pasta y el medio de enfriamiento (K)	Flujo máximo de calor a extraer con el sistema de enfriamiento (kW)	Flujo de Agua necesario (m <sup>3</sup> /s)
663.96	27.80	47.00	983.68	0.0588

Tabla No.46: Especificaciones del motor a emplear para el movimiento del sistema de agitación del reactor continuo agitado

Potencia del motor a emplear (HP)	Velocidad de giro del motor (rpm)	Voltaje de funcionamiento a 60 Hz (V)	Corriente empleada por el motor a carga completa (A)	Factor de Potencia estimado
100	1185	230/460	244.0 /122.0	1.15
Eficiencia nominal NEMA	Marca	Material de construcción de la carcasa	Voltaje de funcionamiento a 50 Hz (V)	Cojinetes de soporte del eje
94.1%	Dayton	Hierro Colado	190/380	De bolas con doble escudo
Tipo de montura	Precio de compra	Tipo de motor	Diámetro del motor (m)	Largo total del motor (m)
Base rígida Soldada	Q 47,264.00	Trifásico, cumple con las normas NEMA	0.457	0.559
	Largo del eje del motor (m)	Diámetro del eje del motor (m)	Características especiales	
	0.216	0.086	Soporta el trabajo en ambientes con concentraciones considerables de Polvo	

Tabla No.47: Especificaciones del agitador a emplear en el reactor continuo agitado

Altura estimada en donde se encontrará el agitador dentro del Reactor (m)	Diámetro del eje de agitación (m)	Altura de las paletas del agitador(m)	Ancho necesario de las paletas de agitación (m)	Espesor de las paletas de agitación (m)
1.460	0.0856	0.146	0.582	0.0127
	Número de paletas del agitador	Inclinación de las paletas del agitador	Altura del eje del agitador (m)	
	6	45°	4.56	

Tabla No.48: Especificaciones del variador de frecuencias y del arrancador a emplear con el motor del sistema de agitación del reactor continuo agitado

Potencia del motor (HP)	Voltajes de funcionamiento (V)	Rango de frecuencias que se pueden emplear (Hz)	Corriente estimada de salida (A)	Altura del variador (m)
100	380 -480	50- 60	150.0	0.879
Precio de compra	Ancho del variador (m)	Espesor del variador (m)	Protecciones del variador y del arrancador	Altura del arrancador (m)
Q 92,000.00	0.378	0.269	De Corriente, de sobrevoltaje, de bajo voltaje, de temperatura.	0.347
	Ancho del arrancador (m)	Espesor del arrancador (m)	Funciones del arrancador	
	0.150	0.102	Controlador programable de consumo de potencia en el arranque del motor	

Tabla No.49: Especificaciones del medidor de flujo a utilizar en los caudales de soda cáustica, ácido sulfónico y agua a utilizar

Flujo mínimo detectable (m <sup>3</sup> /s)	Flujo máximo detectable (m <sup>3</sup> /s)	Tipo de medidor	Marca	Rango de señales de salida (mA)
1.58E-05	0.00820	Medidor de Pulsos	Hays	4-20
Precio de compra del equipo	Temperatura máxima de operación (°C)	Presión máxima de operación (kPa)	Voltaje empleado por el medidor (V)	Diámetro de entrada y salida del medidor (m)
Q 8,256.00	40.6	1034.0	24.0	0.0381

Tabla No.50: Especificaciones de los medidores de temperatura a utilizar en el reactor continuo agitado

Tipo de sensor empleado	Máxima distancia del indicador y el sensor (m)	Número de señales de entrada	Número de señales de salida	Rango de señales manejados (mA)	Marca
Sensor lineal de platino	304.8	2	2	4-20	Honeywell
Precio de compra del equipo	Rango de temperaturas de operación (°C)	Altura del indicador (m)	Ancho del indicador (m)	Espesor del indicador (m)	
Q 4,998.40	-40 - 100	0.229	0.152	0.0889	

Tabla No.51: Especificaciones del indicador de nivel a utilizar en el reactor continuo agitado

Marca	Tipo de indicador	Precio de compra	Rango de señales manejados (mA)
Honeywell	Indicador de nivel de flotador resistente a la corrosión	Q 2,500.00	4-20

## Apéndice I: Datos calculados para el análisis económico efectuado

Tabla No.52: Datos calculados para la estimación de costos de compra del equipo a emplear en el reactor continuo agitado

Equipo	Precio de compra	Número de equipos necesarios	Costo total	Fuente de estimación de costos
Reactor de acero inoxidable	Q 590,000.00	1	Q 590,000.00	<a href="http://www.metalsdepot.com">www.metalsdepot.com</a>
Chaqueta de intercambio de calor	Q 195,000.00	1	Q 195,000.00	Cotización del taller interno
Motor del agitador	Q 47,264.00	1	Q 47,264.00	<a href="http://www.grainger.com">www.grainger.com</a>
Agitador de popela de acero inoxidable	Q 255,000.00	1	Q 255,000.00	Cotización del taller interno
Soportes verticales y horizontales, soldadura y pernos	Q 27,400.00	-	Q 27,400.00	Cotización del taller interno
Sistema de reducción de velocidad y soporte del eje	Q 155,000.00	1	Q 155,000.00	<a href="http://www.grainger.com">www.grainger.com</a>
Variador de frecuencias	Q 92,000.00	1	Q 92,000.00	<a href="http://www.grainger.com">www.grainger.com</a>
Medidores de flujo	Q 8,256.00	4	Q 33,024.00	<a href="http://www.grainger.com">www.grainger.com</a>
Medidores de temperatura	Q 4,998.40	3	Q 14,995.20	<a href="http://www.grainger.com">www.grainger.com</a>
Indicador de nivel	Q 2,500.00	1	Q 2,500.00	<a href="http://www.grainger.com">www.grainger.com</a>
Total de costo de compra del equipo a emplear			Q 1,412,183.20	

Tabla No.53: Datos calculados para la determinación de los beneficios económicos obtenidos en lo que respecta a mano de obra, con la instalación del reactor continuo agitado

Nivel del Operador	Descripción	Número de operadores empleados con el proceso actual por turno	Número de operadores empleados con el uso del reactor por turno	Costos anuales de mano de obra con el proceso actual	Costos anuales de mano de obra con la instalación del reactor
1/2	Limpieza	5	2	Q 303,750.00	Q 121,500.00
1	Empacador	40	40	Q3,600,000.00	Q 3,600,000.00
2	Auxiliar	12	4	Q1,836,000.00	Q 612,000.00
3	Operador	9	2	Q1,620,000.00	Q 720,000.00
4	Mecánico	4	2	Q 810,000.00	Q 405,000.00
			Total	Q8,169,750.00	Q 5,458,500.00

Tabla No.54: Datos calculados para la estimación de costos de compra, instalación, instrumentación y automatización del equipo a emplear en el reactor continuo agitado

Equipo a utilizar	Costo de Compra del equipo	Factor de material para el acero inoxidable (FM)	Factor de temperatura (FT)	Factor de Presión (FP)	Factor de módulo Simple	Estimación del Costo del equipo incluyendo instalación
Reactor Continuo agitado	Q 80,000.00	4	-	1	7	Q 721,244.44
Agitador, placas deflectoras, motor y reductor de Velocidad	Q 280,000.00	2	-	-	2.5	Q 901,555.56
Variador de frecuencias	Q 100,000.00	-	-	-	-	Q 100,000.00
Chaqueta de intercambio de calor	Q 80,000.00	1	-	1	3	Q 309,104.76
<b>Subtotal</b>						Q 2,031,904.76
Costo estimado de automatización e intrumentación						Q 406,380.95
Costo estimado de Tuberías e Instalaciones eléctricas						Q 304,785.71
<b>Costo de módulo Simple</b>						Q 2,743,071.43
Imprevistos y Honorario de consultores						Q 493,752.86
<b>Costo de módulo Total</b>						Q 3,236,824.29
Costo de Soportería e Instalaciones auxiliares						Q 485,523.64
<b>Capital básico a utilizar</b>						Q 3,722,347.93

Tabla No.55: Datos calculados para la determinación de los beneficios económicos obtenidos con la instalación del reactor continuo agitado

Costos mensuales de soda extra empleada	Costos mensuales de ácido sulfónico extra empleado	Costos mensuales extra de los materiales de postadición	Costos mensuales de material rechazado
Q 20,072.50	Q 44,444.57	Q 20,512.62	Q 63,200.00
Ahorros anuales de mano de obra en la producción con el reactor continuo agitado	Costos de desechar la producción rechazada mensualmente	Costos extra totales mensuales de producción por lotes	Costos extra totales anuales de producción por lotes
Q 2,711,250.00	Q 162,500.00	Q 536,667.19	Q 6,440,006.24

## Apéndice J: Métodos analíticos empleados en la evaluación de los parámetros fisicoquímicos de las fórmulas

### Método 1: Determinación volumétrica de ingrediente activo aniónico en jabones y detergentes

a. Principio: Este método se basa en el hecho de que los surfactantes aniónicos reaccionan con el azul de metileno para formar una sal soluble en cloroformo. Es decir, que al agitar una mezcla acidificada de dos fases (cloroformo-agua), conteniendo azul de metileno y detergente aniónico, el color azul permanecerá en la fase orgánica. La adición de un surfactante catiónico, causa la formación de un complejo con el compuesto aniónico, que permite el desplazamiento del color azul a la fase acuosa. Con frecuencia se emplean mezclas de indicadores, que producen distintos colores de las fases acuosa y orgánica, y hacen evidente el cambio de color de la fase acuosa, para la detección del punto final.

#### b. Equipo empleado

- Titulador automático o buretas manuales
- Agitador magnético

#### c. Reactivos a utilizar

- Hyamina 0.005N
- Mezcla de indicadores
- Agua destilada

#### d. Procedimiento

- Pesar 1g de jabón o detergente en un balón aforado de 100mL y aforar con agua destilada.
- Agitar durante 10 minutos y observar que la muestra se encuentre completamente disuelta al finalizar la agitación.
- Tomar una alícuota de 10mL y pasarla a una probeta de 100mL.
- Agregar 10mL de la mezcla de indicadores.
- Agregar en la campana de extracción 15mL de cloroformo.
- Poner el tapón de hule y agitar vigorosamente; comprobar que se separan las fases al dejar de agitar.
- Titular con hyamina al 0.005N, hasta que el color de la fase acuosa sea azul.

e. Cálculos: Para calcular la concentración o porcentaje de ingrediente activo en una muestra, a partir de la titulación con hyamina, deberá de emplearse la siguiente fórmula:

$$\%IA = VC \times 343 / W \quad (109)$$

donde V es el volumen de hyamina empleado en la titulación, C es la concentración de hyamina empleada en la titulación y W es el peso de la muestra empleada en el análisis.

## Método 2: Determinación de la densidad de pastas y suspensiones

a. Principio: La muestra es añadida a una taza de volumen conocido a través de un embudo. El exceso de muestra es eliminado pasando una espátula grande por el borde del recipiente, después el recipiente con muestra es pesado. El peso de muestra es dividido por el volumen del recipiente.

### b. Equipo empleado

- Recipiente de volumen conocido
- Balanza analítica Mettler Toledo ABI04

### c. Procedimiento

- Colocar la taza seca y vacía en la balanza, presionar el botón de tara.
- Llene el recipiente a aproximadamente el 90% de su capacidad.
- Dejar que la muestra fluya libremente dentro de la taza.
- Eliminar cualquier exceso de muestra utilizando una espátula para que la muestra quede a nivel con la parte superior de la taza.
- Pesar la taza con la muestra y registrar el peso.

d. Cálculos: Para calcular la densidad de la muestra utilizada, deberá de emplearse la siguiente fórmula:

$$\rho = M / V \text{ (110)}$$

donde V es el volumen conocido y calibrado del recipiente, y M es el peso del contenido del recipiente al efectuar el análisis.

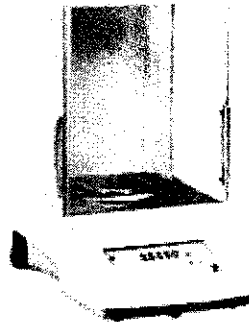


Figura No. 20: Balanza analítica empleada en el método analítico especificado

### Método 3: Determinación de la humedad relativa en pastas y suspensiones

a. Principio: El análisis empleado para la determinación de la humedad relativa en una muestra o del contenido de agua de la misma, se basa en la determinación de la pérdida de peso que tiene un material al ser sometido durante cierto tiempo a una fuente calor externa, que eleva la temperatura de la muestra hasta un valor objetivo. Este método determina en realidad el total de volátiles que se encuentran en la muestra analizada, pues el calor provocará la evaporación de los mismos y no únicamente del agua.

#### b. Equipo empleado

- Balanza de determinación de humedad Ohaus MB-200.
- Platos de aluminio para balanza analítica
- Espátula

#### c. Procedimiento

- Asegurarse que el platillo de aluminio se encuentre completamente seco.
- Colocar el platillo en la balanza y presionar el botón de tara.
- Oprimir el botón Select y colocar la balanza a una temperatura de 205°C.
- Oprimir de nuevo del botón Select e indicar el tiempo de duración del análisis, que debe de ser de 25 minutos.
- Colocar sobre el platillo de aluminio de 2 a 6 g de muestra, asegurándose que ésta quede esparcida sobre el platillo.
- Cerrar la balanza y oprimir el botón Start.
- Tomar la lectura del porcentaje de humedad de la muestra que la balanza calcula.

d. Cálculos: Para calcular el porcentaje de humedad en una muestra, la balanza deberá de emplear la siguiente fórmula:

$$\% \text{Humedad} = (\text{Peso inicial} - \text{Peso final}) / \text{peso inicial} \times 100\% \text{ (111)}$$

donde el peso inicial es el de la muestra que se coloca en la balanza analítica, y el peso final es el que se obtiene de la muestra, luego de terminar el proceso de secado en la balanza de humedad.



Figura No. 21 Balanzas de humedad empleadas en el análisis

#### Método 4: Determinación de la viscosidad de pastas y suspensiones de jabones y detergentes

a. Principio: Este análisis se basa en el empleo del viscosímetro para analizar por medio de agujas la viscosidad en las muestras líquidas. El equipo empleado hace girar una aguja especialmente diseñada y calibrada, midiendo la fuerza de oposición que presenta el líquido a este movimiento, lo cual le permite calcular la viscosidad del material analizado.

#### b. Equipo empleado

- Viscosímetro Brookfield modelo L-250.
- Agujas de medición de viscosidad.
- Base móvil y recipiente de capacidad suficiente para sumergir la aguja.

#### c. Procedimiento

- Colocar suficiente muestra para que la aguja pueda sumergirse hasta la marca indicada por la misma.
- Poner la aguja necesaria en el viscosímetro.
- Presionar el botón de encendido.
- Presionar la tecla de Zero y dejar que el equipo se estabilice (hasta que los números de lectura de viscosidad se encuentren en 0).
- Llevar la aguja dentro de la solución a analizar por medio de la base móvil.
- Presionar el botón de Read.
- Tomar la lectura de la viscosidad de la pantalla del equipo.

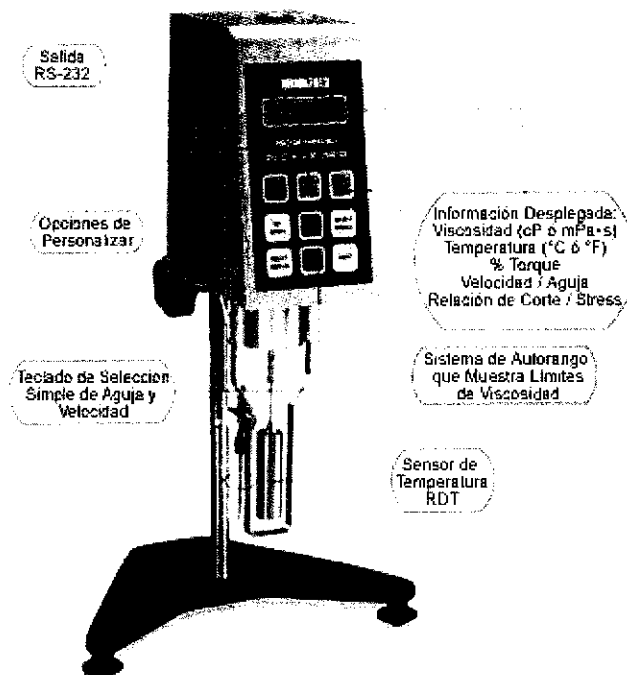


Figura No. 22: Viscosímetro empleado en los análisis

### Método 5: Determinación del pH de pastas y suspensiones

a. Principio: El análisis empleado se basa en el empleo de un electrodo de medición de pH, que es capaz de detectar la diferencia de potencial causada por la concentración de hidrógeno en solución. Este aparato debe de calibrarse con estándares de referencia de pH conocido, que permitan la lectura en la mayor parte de la escala de medición (de 1 a 14).

#### b. Equipo empleado

- Medidor de pH Hanna serie 501c.
- Electrodo de plata-cloruro de plata.

#### c. Reactivos a utilizar

- Buffer de pH 7
- Agua destilada

#### d. Procedimiento

- Enjuagar el electrodo del medidor de pH con suficiente agua destilada.
- Sumergir el electrodo en la muestra a medir, asegurándose que la misma no se encuentre a una temperatura superior a los 45°C.
- Tomar la lectura directamente del equipo.
- Enjuagar de nuevo el electrodo con suficiente agua.
- Colocar el electrodo dentro del un recipiente con buffer de pH 7.

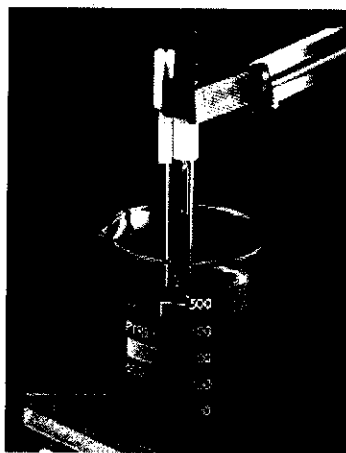


Figura No. 23: Medición de pH de una muestra líquida

## Apéndice K: Métodos diseñados en la obtención experimental de los resultados buscados

### Método 1: Determinación de la capacidad calorífica específica de compuestos líquidos

a. Principio: El procedimiento diseñado para la obtención de las capacidades caloríficas específicas en función de la temperatura, se basa en la definición básica de capacidad calorífica, donde encontrando el cambio de energía del sistema, y conociendo su masa y cambio de temperatura, puede estimarse de manera sencilla la capacidad calorífica del compuesto calentado o enfriado. El procedimiento se centra en el enfriamiento, dado que por medio de éste es más sencillo el encontrar una cantidad conocida de energía intercambiada en el sistema.

En el procedimiento, se podría alimentar una cantidad conocida de energía al sistema, para luego observar el cambio de temperatura que esto produce; sin embargo, dado que la capacidad calorífica del agua es bien conocida, resulta más sencillo el emplear esta fuente para la estimación del cambio de energía del sistema.

Entonces, el proceso consta del calentamiento de una muestra, que se coloca dentro de un recipiente aislado con agua, observando como la temperatura de la muestra y el agua van cambiando, conforme el agua se calienta y la muestra se enfría.

#### b. Equipo empleado

- Recipientes de acero inoxidable.
- Calentador de resistencia para la muestra a analizar.
- Aislamiento de fibra de vidrio para el recipiente externo.
- Sensores de temperatura.

#### c. Reactivos a utilizar

- Agua destilada

#### d. Procedimiento

- Llenar el recipiente externo con agua fría hasta la marca interna.
- Llenar el recipiente interno con la muestra que se quiere analizar.
- Sumergir la resistencia de calentamiento en la muestra a analizar y cerrar el recipiente interno.
- Colocar el sensor de temperatura del recipiente interno.
- Calentar la muestra hasta aproximadamente 95°C.
- Al estar la muestra en 90°C, sumergirla en el recipiente con agua fría, cerrando rápidamente el sistema completo.
- Tomar la lectura de la temperatura del agua, conforme la temperatura de la muestra desciende, aproximadamente cada 2.5°C de descenso en la temperatura de la muestra.

## Método 2: Determinación del calor estándar de reacción

a. Principio: Este método se basa en el principio de que las reacciones químicas al presentar un cambio en la configuración atómica de las sustancias, cambian de estado energético, requiriendo del suministro de energía, o bien, dispersándola en forma de calor.

Con este calor producido, se generan dentro de los sistemas cambios de temperatura de las sustancias, por medio de los cuales se puede determinar la cantidad energética específica que se genera o consume en una reacción dada.

### b. Equipo empleado

- Recipiente agitado
- Sensor de temperatura

### c. Reactivos a utilizar

- Agua destilada.
- Soda cáustica al 50%(m/m).
- Ácido sulfónico lineal

### d. Procedimiento

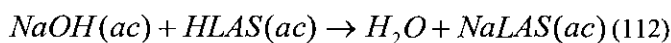
- Pesar según la fórmula a utilizar, las cantidades de agua, base y ácido a emplear en la reacción de neutralización.
- Agregar al recipiente la cantidad de agua pesada.
- Encender el sistema de agitación.
- Adicionar la cantidad de soda pesada.
- Registrar la temperatura más grande obtenida en el sistema al adicionar la soda cáustica.
- Agregar la cantidad de ácido sulfónico pesado.
- Registrar la temperatura inicial de reacción y la temperatura máxima a la que llega el sistema al final de la reacción.

## Apéndice L: Cálculo de muestra del método de evaluación experimental de la cinética de reacción

1. Determinación de la fórmula a utilizar y de las propiedades de la pasta en función de la temperatura: En este caso, el primer cálculo necesario a efectuar, es la determinación de los porcentajes de cada uno de los componentes, que deben de tener las fórmulas para cumplir con los parámetros claves de calidad, especificados en la Tabla No.9. Para este efecto, puede notarse que la única diferencia significativa, de los requerimiento en las plantas de jabones y detergentes, son las especificaciones de ingrediente activo y de humedad, los cual se debe a las características de los procesos manejados.

En jabones se maneja una pasta con menor ingrediente activo, y el resto de parámetros se considera que debe de caer dentro de la pasta de detergentes, dado que no son variables que interfieran en el proceso. Esta disparidad de ingredientes activos en la pasta, puede solucionarse fácilmente, dado que se puede agregar mayor cantidad de agua a la fórmula de jabones, para permitir alcanza el ingrediente activo necesario. Debido a esto, y a los requerimientos especiales de la pasta para el área de detergentes, se usará como objetivo el valor de ingrediente activo necesario en la planta de detergentes.

Entonces, empleando el ingrediente activo necesario en la pasta de detergentes, se sabe que la ecuación de la reacción de neutralización es:



donde HLAS es el ácido sulfónico lineal y NaLAS es el sulfonato de sodio.

Y además, se conoce que:

$$\%IA = \frac{\text{masa de sulfonato}}{\text{masa de la muestra}} \times 100\% \quad (113)$$

Entonces, utilizando una base de cálculo de 100g de muestra y conociendo el valor objetivo de ingrediente activo de 58.7%(m/m), puede calcularse el peso necesario de sulfonato en la muestra de 100g, con lo que se obtiene:

$$\frac{\%IA}{100\%} \times (\text{masa de la muestra}) = \text{masa de sulfonato}$$

e ingresando los valores:

$$\text{masa de sulfonato} = \frac{58.70\%}{100\%} \times (100 \text{ g}) = 58.7 \text{ g de sulfonato}$$

Ahora bien, conociendo que el peso molecular del sulfonato de sodio es de 344 g/mol, mientras que el peso del ácido dodecilsulfónico es de 322 g/mol, puede calcularse por medio de la estequiometría, la cantidad necesaria de ácido para la producción del porcentaje de ingrediente activo buscado. Este cálculo se muestra a continuación:

$$58.7 \text{ g de sulfonato} \times \frac{1 \text{ mol de sulfonato}}{344 \text{ g}} \times \frac{1 \text{ mol ácido}}{1 \text{ mol sulfonato}} \times \frac{322 \text{ g}}{1 \text{ mol ácido}} = 54.95 \text{ g}$$

Y empleando la base de cálculo anteriormente mencionada, puede obtenerse el porcentaje de ácido sulfónico necesario para la consecución del ingrediente activo buscado. Esto se lleva cabo de la siguiente manera:

$$\%acido = \frac{54.95 \text{ g}}{100 \text{ g base}} \times 100\% = 54.95\%$$

Ahora bien, este es únicamente uno de los ingredientes empleados en la fórmula de producción, pero hace falta fijar la cantidad de soda cáustica al 50%(m/m) y de agua a utilizar. Para este efecto, se hace uso de nuevo de la estequiometría mostrada en la reacción de neutralización, por medio de la cual puede calcularse la cantidad de soda cáustica a emplear en la reacción:

$$58.7 \text{ g de sulfonato} \times \frac{1 \text{ mol de sulfonato}}{344 \text{ g}} \times \frac{1 \text{ mol soda}}{1 \text{ mol sulfonato}} \times \frac{40 \text{ g}}{1 \text{ mol soda}} = 6.83 \text{ g}$$

Sin embargo, se sabe que se dispone de una solución al 50%(m/m), por lo que en realidad el peso a utilizar de esta solución, puede calcularse de la siguiente manera:

$$6.83 \text{ g NaOH} \times \frac{100 \text{ g solución}}{50 \text{ g NaOH}} = 13.66 \text{ g}$$

Y empleando la base de cálculo anteriormente mencionada, puede obtenerse el porcentaje de soda al 50% necesario para la consecución del ingrediente activo buscado. Esto se lleva cabo de la siguiente manera:

$$\%acido = \frac{13.66 \text{ g}}{100 \text{ g base}} \times 100\% = 13.66\%$$

Para calcular el porcentaje de agua a utilizar, el procedimiento a seguir es el restar al 100% los otros porcentajes calculados, de modo que se obtiene para este caso:

$$\%acido = 100\% - 13.66\% - 54.95\% = 31.39\%$$

Ahora bien, con el propósito de obtener el pH deseado en la pasta y a la vez analizar el comportamiento de los demás parámetros, se varían los porcentajes de agua tratada y ácido empleados en la reacción, dejando constante el porcentaje de soda cáustica. De modo, que el proceso mostrado anteriormente establece la tercera fórmula propuesta, mientras las otras se obtienen de sumar o restar 1% al agua tratada y hacer el proceso contrario con el ácido sulfónico. Estos datos se muestran en la Tabla No.32.

Finalmente, es necesario mencionar la manera como se pudo obtener la viscosidad de la pasta en las unidades del sistema internacional, y se realiza por medio de una conversión conocida, y es que 1000 cP son 1 Pa s, con lo que se obtiene, empleando el dato de viscosidad obtenido para los 45.1°C:

$$Viscosidad = (4152 \text{ cP}) \frac{1 \text{ Pa s}}{1000 \text{ cP}} = 4.152 \text{ Pa s}$$

2. Cálculo de la ecuación de representación de la capacidad calorífica en función de la temperatura: Para la determinación de la capacidad calorífica en función de la temperatura, se empleó un aparato, cuyo esquema se muestra en la Figura No. 14. Este aparato permitió el obtener los datos de temperatura de una sustancia dada en función de la temperatura del agua de enfriamiento. Un balance de energía del sistema mencionado sería:

$$\text{energía entrante} - \text{energía saliente} = \text{energía acumulada} - \text{energía generada} \quad (114)$$

Sin embargo, se supone que en el sistema no existe generación de energía, tampoco existe una entrada o salida de calor, dado que se supone que el sistema se encuentra completamente aislado, y además, conociendo que la acumulación de energía se puede escribir en función de la capacidad calorífica específica de la sustancia dada, se obtiene:

$$\text{energía acumulada} = 0 = m_a C_{p_a} \Delta T_a + m_i C_{p_i} \Delta T_i$$

Donde  $m_i$  representa la masa del compuesto  $i$ ,  $C_{p_i}$  la capacidad calorífica específica del compuesto  $i$ , y  $\Delta T_i$  representa el cambio de temperatura del compuesto  $i$ ; mientras que  $m_a$  representa la masa de agua,  $C_{p_a}$  la capacidad calorífica específica del agua, y  $\Delta T_a$  representa el cambio de temperatura del agua.

De este balance de energía, puede obtenerse la fórmula que permite calcular la capacidad calorífica específica de las sustancias a emplear. Esta fórmula es la siguiente:

$$C_{p_i} = -\frac{m_a C_{p_a} \Delta T_a}{m_i \Delta T_i} \quad (115)$$

Claro que para que ella sea válida, debe de estimarse que las pérdidas de calor en el sistema son despreciables. Entonces, utilizando los primeros valores tabulados para el ácido sulfónico, puede calcularse la capacidad calorífica específica de la siguiente manera:

conociendo que,

$$C_{p_a} = 4.178 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$$

$$m_a = 1000.1 \text{ g}, m_i = 100.0 \text{ g}$$

$$T_{a1} = 23.9^\circ\text{C}, T_{a2} = 24.5^\circ\text{C}, T_{i1} = 27.5^\circ\text{C}, T_{i2} = 25.0^\circ\text{C}$$

Entonces, utilizando la ecuación (115):

$$C_{p_{\text{acido}}} = -\frac{1000.1 \text{ g} \times 4.178 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)} \times (24.5^\circ\text{C} - 23.9^\circ\text{C})}{100.0 \text{ g} \times (25.0^\circ\text{C} - 27.5^\circ\text{C})} = 10.03 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$$

Ahora bien, utilizando todos los datos de  $C_p$  calculados para cada sustancia, puede elaborarse una curva de capacidad calorífica específica en función de la temperatura, la cual permite obtener por medio de regresiones polinomiales las ecuaciones buscadas, de la capacidad calorífica específica de las sustancias en función de la temperatura.

3. Determinación del calor estándar de la reacción de neutralización: En el cálculo del calor estándar de reacción o disolución, el procedimiento es el mismo, y se basa en el empleo de masas conocidas que reaccionan entre sí, aumentando gradualmente de temperatura, hasta alcanzar una temperatura máxima. Para estas determinaciones, se emplea el sistema mostrado en la Figura No. 18, a partir del cual se encontraron las temperaturas máximas conseguidas por el sistema con la reacción de neutralización o de disolución.

Con el objetivo de determinar el calor estándar de la reacción, el primer paso es hacer un balance de energía en el sistema, de donde se emplea la ecuación del balance de energía básico mostrado en el cálculo anterior. A partir de esta ecuación, puede afirmarse que la energía de entrada y salida son despreciables, considerando únicamente la energía acumulada, que de nuevo puede representarse a partir de la capacidad calorífica específica de la sustancia, y la energía generada, que puede representarse a partir de la entalpía o calor de reacción y de la cantidad de sustancia empleada (en moles) para la reacción. Las ecuaciones de esta substitución, se muestran a continuación:

$$\text{energía acumulada} = \text{energía generada} \quad (116)$$

Pero,

$$\text{energía acumulada} = m_s C_{p_s} \Delta T_s \quad (117)$$

Donde  $m_s$  representa la masa agregada al sistema,  $C_{p_s}$  la capacidad calorífica específica del sulfonato de sodio y  $\Delta T_s$  representa el cambio de temperaturas que se da en la pasta formada.

Y además:

$$\text{energía generada} = -\Delta H_{rxn} n \quad (118)$$

Donde  $\Delta H_{rxn}$  representa la entalpía o calor específico de reacción y  $n$  representa el número de moles de la sustancia empleada como base en la reacción, en este caso, debido a la estequiometría no importa cual se utilice, pero se tomará como base al ácido sulfónico.

Entonces, substituyendo en la ecuación (116) se obtiene:

$$m_s C_{p_s} \Delta T_s = -\Delta H_{rxn} n \quad (119)$$

A partir de esta ecuación puede despejarse la entalpía o calor estándar de reacción, con lo que se obtiene:

$$-\frac{m_s C_{p_s} \Delta T_s}{n} = \Delta H_{rxn} \quad (120)$$

Ahora bien, el  $C_{p_s}$  puede obtenerse por medio de las ecuaciones encontradas para la capacidad calorífica específica del sulfonato en función de la temperatura. La ecuación encontrada se muestra a continuación:

$$C_p[\text{J}/(\text{g } ^\circ\text{C})] = 2 \times 10^{-6} T[^\circ\text{C}]^4 - 0.0006 T[^\circ\text{C}]^3 + 0.05 T[^\circ\text{C}]^2 - 1.5985 T[^\circ\text{C}] + 39.43 \quad (121)$$

Entonces, empleando los datos de la primera corrida de determinación del calor estándar de la reacción de neutralización, se obtiene:

$$C_{p_s} = 21.02 \text{ J}/(\text{g } ^\circ\text{C})$$

$$m_s = (10 + 12.22)\text{g} = 22.22 \text{ g}$$

$$T_{s1} = 37.5^\circ\text{C}, T_{s2} = 73.1^\circ\text{C}$$

$$n = 12.22 \text{ g}$$

Ingresando estos datos en la ecuación (120), se procede de la siguiente manera:

$$\Delta H_{rxn} = - \frac{(22.22 \text{ g})(21.02 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)})(73.1^\circ\text{C} - 37.5^\circ\text{C})}{12.22 \text{ g } \textit{acido sulfónico} \times \frac{1 \text{ mol } \textit{ácido}}{322 \text{ g } \textit{ácido}}} \times \frac{1 \text{ kJ}}{1000 \text{ J}} = - 438.3 \text{ kJ/mol}$$

Este procedimiento se repite para cada una de las corridas efectuadas y para el calor de disolución y de reacción. Luego de esto, se obtienen los valores promedio para los calores de disolución y de reacción.

4. Cálculo de la ecuación representativa de la cinética de reacción: Para calcular la ecuación de la velocidad de reacción, debe de establecerse el método a utilizar para encontrar la constante de proporcionalidad y los ordenes de reacción. El método a utilizar en este caso es el de la regresión lineal de las concentraciones iniciales o velocidades iniciales. Luego de esto, debe establecerse según la reacción de neutralización, la ecuación base de la velocidad de reacción en función de los componentes que intervienen en la reacción. Por ser una reacción entre ácido y base, puede obtenerse la ley de velocidad de la siguiente forma:

$$r = kC_A^n C_B^m \quad (122)$$

Donde  $C_A$  y  $C_B$  son las concentraciones molares de ácido sulfónico y soda caústica respectivamente; mientras que  $m$  y  $n$  son los ordenes de reacción,  $k$  es la constante de proporcionalidad y  $r$  la velocidad de reacción en mol/Lxs.

Sin embargo, por tratarse de una reacción donde los componentes deben de agregarse de manera estequiométrica, la concentración del ácido sulfónico puede colocarse en función de la concentración de la soda caústica y viceversa. De modo que la ecuación (122) se simplifica para obtener finalmente una ecuación aparente de la siguiente manera:

$$r = kC_A^n \quad (123)$$

Ahora bien, la velocidad de reacción ( $r$ ) puede representarse en función de la concentración de ácido y el tiempo, por medio de la siguiente ecuación:

$$r = - \frac{dC_A}{dt} \quad (124)$$

Con lo que substituyendo se obtiene:

$$- \frac{dC_A}{dt} = kC_A^n \quad (125)$$

Una estimación del valor de la velocidad de reacción puede realizarse con mediciones de intervalos de tiempo en los que la concentración cambia de manera conocida. De manera que:

$$- \frac{dC_A}{dt} \approx - \frac{\Delta C_A}{\Delta t}$$

En las Tablas No.24 a la 28 se muestra la temperatura de la muestra obtenida en función del tiempo, para cada una de las corridas realizadas, con lo que puede calcularse el cambio de temperatura con el tiempo para cada uno de los diferentes intervalos de tiempo utilizados.

Este cambio de temperatura con el tiempo, puede relacionarse con el cambio de concentración con el tiempo, lo cual puede efectuarse de nuevo por medio de un balance de energía parecido al del inciso anterior. Por lo tanto, partiendo de la ecuación (114), se puede despejar el número de moles que reaccionan de la siguiente manera:

$$n = -\frac{m_s C_{p_s} \Delta T_s}{\Delta H_{rxn}} \quad (126)$$

Pero se sabe que  $C_A = n / V$ , donde  $n$  es el número de moles de ácido sulfónico y  $V$  es el volumen de pasta en el reactor. Entonces, puede relacionarse el cambio de concentración de ácido con el tiempo de la siguiente manera:

$$C_A = \frac{n}{V} = -\frac{m_s C_{p_s} \Delta T_s}{Vx\Delta H_{rxn}} \quad (127)$$

Y entonces:

$$\frac{\Delta C_A}{\Delta t} = \frac{m_s C_{p_s}}{Vx\Delta H_{rxn}} x \frac{\Delta T}{\Delta t} \quad (128)$$

Ahora bien, empleando el método mencionado de las velocidades iniciales, únicamente es necesario efectuar estos cálculos para el arranque de la reacción, y dado que a menor intervalo de tiempo, la precisión de la aproximación diferencial aumenta, se escoge el mínimo intervalo de tiempo posible. Entonces, empleando los datos de la primera corrida de la determinación de la cinética de reacción, puede calcularse la velocidad de reacción de la siguiente manera:

$$C_{p_s} = 23.38 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$$

$$m_s = 2.0 \text{ L} \times 1.3 \text{ kg/L}$$

$$V = 2.0 \text{ L}$$

$$\Delta H_{rxn} = -475.44 \text{ kJ/mol}$$

$$T_1 = 65.13^\circ\text{C}, T_2 = 65.2^\circ\text{C}$$

$$t_1 = 1 \text{ s}, t_2 = 2 \text{ s}$$

Entonces, el cambio de concentración con el tiempo para la primera corrida se obtiene de la siguiente manera:

$$\left( \frac{\Delta C_A}{\Delta t} \right)_0 = \frac{(2.0 \text{ L} \times 1.3 \text{ kg/L})(23.38 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)})}{(2.0 \text{ L})(-475.44 \text{ kJ/mol})} x \frac{(65.2^\circ\text{C} - 65.13^\circ\text{C})}{(2 \text{ s} - 1 \text{ s})} = -0.0048 \text{ M/s}$$

Mientras tanto, puede calcularse también la concentración inicial de ácido sulfónico para esta velocidad de reacción, dado que se conoce el volumen de pasta, se conoce la masa de ácido agregada, y puede despreciarse el volumen del ácido agregado debido a que es mucho menos que el de la pasta. Entonces, empleando la relación mostrada en la ecuación (127), puede obtenerse:

$$C_{A0} = \frac{n}{V} = \frac{(5 \text{ g ácido})0.965[\text{concentracion}]}{2.0 \text{ L}} \times \frac{1 \text{ mol}}{322 \text{ g ácido}} = 0.0075 \text{ M}$$

Ahora bien, substituyendo y linealizando la ecuación (125), se obtiene:

$$\ln\left(-\frac{dC_A}{dt}\right) = \ln(k) + n \ln(C_A) \quad (129)$$

Y empleando únicamente las velocidades iniciales de reacción, se obtiene:

$$\ln\left(-\frac{dC_A}{dt}\right)_0 = \ln(k) + n \ln(C_{A0}) \quad (130)$$

Por lo tanto, al realizar una curva con los valores logarítmicos de todos los cambios de concentración inicial de ácido sulfónico con el tiempo, con las concentraciones iniciales de ácido en solución, puede obtenerse la Gráfica No.9, de donde puede hacerse una regresión lineal que proporciona la siguiente ecuación:

$$y = 1.0369x - 0.2689 \quad (131)$$

Donde x son los logaritmos naturales de las concentraciones iniciales de ácido en la solución y "y" representa el logaritmo de los cambios de concentración inicial de ácido sulfónico con el tiempo.

Al utilizar esta ecuación y compararla con la (130), puede notarse que:

$$n = 1.04 \approx 1 \quad \text{y} \quad \ln(k) = -0.2689$$

De donde se obtiene que:

$$k = e^{-0.2689} = 0.7642 \text{ s}^{-1}$$

Y por lo tanto, la ecuación obtenida para la ley de velocidad aparente de la reacción de neutralización del ácido sulfónico es la siguiente:

$$r = 0.7642 C_A^{-1} \quad (132)$$

## Apéndice M: Cálculo de muestra del método de diseño del reactor continuo agitado y de la evaluación económica realizada

1. Determinación del volumen del reactor y el dimensionamiento del equipo auxiliar del reactor: El primer procedimiento para determinar el volumen de un reactor continuo agitado, es el establecimiento de los parámetros necesarios en la ecuación de diseño del reactor. La ecuación de diseño del reactor continuo agitado es la siguiente:

$$V = \frac{F_{A0} X}{-r_A} \quad (133)$$

donde  $F_{A0}$  representa el flujo molar del compuesto A, que en este caso es ácido sulfónico Lineal, X representa la conversión del ácido sulfónico, y  $-r_A$  representa la velocidad de reacción del ácido sulfónico.

Sin embargo, al sustituir la ecuación (132), se obtiene la siguiente expresión:

$$V = \frac{F_{A0} X}{0.7642 C_A^1} \quad (134)$$

Ahora bien, en las fábricas de jabones y detergente, se sabe que la reacción debe de estar completa, a modo de que no quede nada de ácido remanente en la solución de salida del reactor. Sin embargo, para efectos prácticos, y con el fin de no elevar demasiado el tiempo de reacción, se considera una conversión de 99.99% como un valor aceptable.

El flujo de entrada de ácido sulfónico, puede estimarse a partir del flujo de masa necesario a la salida del reactor, el cual se muestra en la Tabla No.29. Para este proceso, debe de seguirse un procedimiento estequiométrico, parecido al mostrado para el cálculo de la fórmula a emplear. En este caso, al emplear la fórmula propuesta No.3, se obtiene:

$$2900 \text{ kg/h} \times \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} \times \frac{55 \text{ g ácido}}{100 \text{ g solución}} \times \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \times \frac{1 \text{ mol}}{322 \text{ g ácido}} = 1.38 \text{ mol/s}$$

Y la concentración de ácido sulfónico en el reactor, puede calcularse por medio de la estimación del flujo molar de ácido y el flujo volumétrico de salida. Entonces, empleando la ecuación (134), puede obtenerse el volumen del reactor de la siguiente manera:

$$V = \frac{(0.9999)(1.38 \text{ mol/s})}{(0.7642 \text{ s}^{-1}) \left( \frac{(1.38 \text{ mol/s})(1-0.9999)}{2900 \text{ kg/h} \times \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} \times \frac{1 \text{ L}}{1.3 \text{ kg}}} \right)^1} \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} = 8.11 \text{ m}^3$$

Esto puede efectuarse gracias al hecho de que la conversión del compuesto A se define como:

$$X = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \quad (135)$$

donde  $C_{A0}$  representa la composición inicial del compuesto A y  $C_A$  representa la concentración de A en un tiempo dado.

De donde puede deducirse que la multiplicación del flujo molar a la entrada de A por el factor de uno menos la conversión, representará el flujo molar del compuesto A presente en el reactor continuo agitado, es decir:

$$F_{A0}(1-X) = F_{A0} \left( 1 - \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \right) = F_A \quad (136)$$

Pero además, se sabe que:

$$\frac{F_A}{v_A} = C_A \quad (137)$$

donde  $F_A$  representa el flujo molar del compuesto A,  $v_A$  representa el flujo volumétrico empleado en el reactor, y  $C_A$  representa la concentración del compuesto A.

Ahora bien, en base al Volumen calculado para el reactor, pueden calcularse principalmente dos factores a tomar en cuenta en el diseño, que son: el tiempo medio de residencia en el reactor y las dimensiones a emplear en el mismo.

El tiempo de residencia puede calcularse por medio de la siguiente fórmula:

$$\frac{V}{v} = \tau \quad (138)$$

donde  $\tau$  representa el tiempo medio de residencia en el reactor continuo agitado,  $V$  representa el volumen calculado para dicho reactor, y  $v$  representa el flujo volumétrico empleado en el reactor.

Entonces, empleando los datos de volumen y flujo másico anteriormente calculados, puede calcularse el tiempo de residencia de la siguiente manera:

$$\tau = \frac{8.11 \text{ m}^3}{\left( \frac{0.816 \text{ kg/s}}{1300 \text{ kg/m}^3} \right)} \times \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 3.63 \text{ h} \quad (139)$$

Mientras tanto, para el cálculo de las dimensiones del reactor, deben de tomarse en cuenta muchos otros aspectos, de los que depende el equipo a diseñar. Primero, debe de encontrarse un rango recomendado por la literatura para la relación entre la altura y el diámetro; este rango se encuentra entre 1 y 1.5. Luego debe de escogerse una relación basada en el compuesto a emplear y sus características; en este caso, la relación empleada en algunos equipos de fabricación de jabones y detergentes es de 1.32. De modo que el cálculo de las dimensiones del reactor se efectúa por medio de la fórmula básica del volumen de un cilindro, que es:

$$V = \frac{\Pi}{4} D^2 h \quad (140)$$

Pero sabiendo que  $h = 1.32 D$ , puede despejarse el diámetro del reactor de la siguiente forma:

$$V = \frac{\Pi}{4} D^2 (1.32) D$$

Entonces

$$D = \left( \frac{4}{\Pi} x \frac{V}{1.32} \right)^{1/3}$$

Empleando el valor calculado del volumen de reacción, pueden obtenerse las dimensiones del reactor de la siguiente manera:

$$D = \left( \frac{4}{\Pi} x \frac{8.11 \text{ m}^3}{1.32} \right)^{1/3} = 1.98 \text{ m}$$

$$h = 1.32 D = 1.32 x 1.98 \text{ m} = 2.62 \text{ m}$$

Ahora bien, un parámetro muy importante a tomar en cuenta en este caso, es que el trabajo del reactor se llevará a cabo con materiales de considerable corrosividad, que reaccionarán a altas temperaturas en una reacción exotérmica, de donde el material de construcción debe de ser resistente y debe estar protegido contra la corrosión. Es por esto que se decide hacer todo el equipo de acero inoxidable 316, lo cual implica costos extra por el material del equipo, pero provee de un equipo altamente resistente y capaz de realizar el trabajo para el que fue diseñado. A partir de esto, se deduce claro, que unas de las partes que pueden afectarse en el reactor son las soldaduras, ya que estas serán sectores de forma diferente al resto del reactor y que tenderán a ser atacadas por el material corrosivo. Por este motivo y por resistencia de la estructura total del reactor, el soldado debe de hacerse la menor cantidad de veces posible, limitando la acción de desgaste del mismo. Entonces, debe de tomarse en cuenta el tamaño de las placas disponibles en el mercado, a modo de que las soldaduras se minimicen.

El tamaño de estas placas se muestra en la Tabla No. 43 y por medio de estas dimensiones de las placas más grandes disponibles en el mercado, puede calcularse con la fórmula del perímetro de un círculo, el diámetro a obtener con estas placas disponibles. La fórmula a emplear es la siguiente:

$$P = 2\Pi r = \Pi D \quad (141)$$

donde P es el perímetro del círculo y D el diámetro del mismo.

De este modo, al poseer placas de 6.1 m de ancho y 1.82 m de alto, puede emplearse como perímetro del círculo, constituyente bidimensional del cilindro del reactor, al ancho disponible de placas. De modo que despejando, se obtiene el diámetro posible de construcción del reactor, de la siguiente manera:

$$D = \frac{P}{\Pi} = \frac{6.1 \text{ m}}{\Pi} = 1.94 \text{ m}$$

Es claro, que con este diámetro y la altura disponible de placas, no se puede construir el reactor con una sola placa. Sin embargo, debe de notarse que la forma del reactor a construir tampoco es cilíndrica totalmente. El reactor propuesto presenta unas partes semiesféricas en los extremos del cilindro, que abarcan un cierto volumen, y permiten el empleo del diámetro anterior, siempre respetando la altura original propuesta.

Ahora bien, dado que el diámetro del cilindro y por lo tanto de las secciones semicirculares ya se encuentra fijo, y que la altura del cilindro también está fija, se debe de proceder a calcular el volumen total con todas las secciones integradas, para garantizar que se alcanza el volumen deseado de reactor.

Entonces, para calcular el volumen de las secciones, basta con emplear las fórmulas de volumen del cilindro y la esfera, que se muestran a continuación:

Esfera

$$V = 4/3\Pi r^3 = 4/3\Pi\left(\frac{D}{2}\right)^3 \quad (142)$$

Cilindro

$$V = \frac{\Pi}{4} D^2 h \quad (143)$$

Entonces, para las secciones semicirculares, empleando el diámetro calculado de 1.94m, se obtiene:

$$V = 4/3 \Pi \left(\frac{1.94 \text{ m}}{2}\right)^3 \times 1/2 = 1.91 \text{ m}^3$$

Y con la altura y el diámetro fijados se obtiene para el cilindro:

$$V = \frac{\Pi}{4} \times (1.94 \text{ m})^2 \times 2.62 \text{ m} = 7.75 \text{ m}^3$$

Para obtener finalmente un volumen total del reactor de la suma de las tres secciones, de la siguiente manera:

$$V = \text{semiesferas} \times 2 + \text{cilindro} = 1.91 \text{ m}^3 \times 2 + 7.75 \text{ m}^3 = 11.57 \text{ m}^3$$

En base a estos volúmenes y estas dimensiones, puede estimarse la altura en el cilindro en donde se encontrará normalmente el líquido. Esto puede efectuarse a partir de la fórmula del cilindro, conociendo que el volumen de la semiesfera inferior se encuentra lleno de material, y que el volumen a ocupar por el material sigue siendo  $8.1 \text{ m}^3$ . Este procedimiento se muestra a continuación:

$$h = \frac{(V_{\text{react}} - V_{\text{semiesfera}})}{\frac{\Pi}{4} D^2} = \frac{(8.11 \text{ m}^3 - 1.91 \text{ m}^3)}{\frac{\Pi}{4} (1.94 \text{ m})^2} = 2.10 \text{ m}$$

El siguiente proceso del diseño es determinar el grosor del acero inoxidable a emplear en el reactor. Para este efecto, puede calcularse la presión en el fondo del reactor agitado, lo cual podrá emplearse comparativamente con las resistencias de materiales, para garantizar que el reactor podrá soportar la carga y la corrosividad y temperatura de los materiales. Entonces, para calcular la presión en el fondo del reactor, se emplea la siguiente fórmula:

$$P = \rho g h \quad (144)$$

donde P es la presión a ejercer sobre el fondo del tanque, g es la aceleración impartida por la gravedad, h es la altura donde se encuentra el fluido y  $\rho$  es la densidad de la pasta.

Entonces, empleando las cantidades conocidas de densidad de la pasta y de  $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ , puede calcularse por medio de la altura total (altura alcanzada dentro del cilindro + radio de la semiesfera), la presión en el fondo del tanque, esto se muestra en el siguiente paso:

$$P = (1300 \text{ kg/m}^3)(9.81 \text{ m/s}^2)(1.94 \text{ m}/2 + 2.10 \text{ m}) \times \frac{1 \text{ kPa}}{1000 \text{ Pa}} = 53.44 \text{ kPa}$$

Con lo que al comparar y debido a factores de seguridad para la corrosividad del material, se decide el emplear placas de 0.0064 m de espesor de acero inoxidable 316.

Finalmente, es necesario el diseñar un espacio de Venteo en el Reactor, que sea capaz de liberar una sobrepresión del sistema o un flujo de vapor de agua que se pueda llegar a producir en la reacción. Para este efecto, podría calcularse la cantidad de agua que es capaz de llevarse consigo el aire a la temperatura de trabajo y a presión atmosférica, dado que la presión en este reactor líquido no es tan relevante. Sin embargo, como una regla gruesa, puede aproximarse el diámetro de venteo para este tipo de reacciones como de un 5% del diámetro total del recipiente, de modo que el diámetro del espacio de venteo, se puede estimar como:

$$D_{\text{Venteo}} = D_{\text{reactor}} \times 5\% = 1.94 \text{ m} \times 0.05 = 0.097 \text{ m}$$

Mientras que la cantidad de agua máxima perdida, según los estudios previos realizados, puede estimarse como el 2.5% del flujo de agua de salida, que se estima a partir del resultado analítico de la humedad de la pasta a la salida, de la siguiente forma:

$$\text{Flujo}_{\text{Venteo}} = \text{Flujo}_{\text{agua}} \times 2.5\% = (0.806 \text{ kg / s})(0.415) 0.025 = 0.0084 \text{ kg / s}$$

2. Diseño de los sistemas auxiliares del reactor agitado: En el reactor a utilizar, existen principalmente tres sistemas que debe diseñarse y que son los controladores principales de la reacción: la agitación, la temperatura y el flujo de entrada de material.

El flujo de entrada de material, en realidad es un sistema ya adaptado y totalmente diseñado, que dosifica a cada una de las áreas el material a utilizar, dentro de la planta en la que se efectuaron los estudios. Por esta razón, no es necesario el diseño de este sistema, a parte de la selección de medidores de flujo de entrada, que permitan el originar una señal del flujo que se tenga. La selección de estos equipos debe de hacerse por medio de las especificaciones del proveedor, siendo el más ajustable a las necesidades del proceso, el mostrado en la Tabla No.49.

En lo que se refiere al sistema de agitación, debe de decidirse en primera instancia sobre el tipo de agitador que se tendrá en el reactor, así como sobre los patrones de flujo que se desean en el mismo. En este caso, se optará por un flujo turbulento, que permita una mezcla homogénea de los reactivos en la pasta, lo cual se consigue por medio de deflectores en el reactor.

Por tratarse de una pasta de viscosidad considerable, es necesario el emplear un tipo de aspas que provoquen un flujo axial y no radial, para que la circulación sea completa en el reactor y la homogenización se lleve a cabo de mejor manera.

Este hecho se muestra de manera más clara al comparar los patrones de flujo obtenidos con agitadores axiales o radiales.

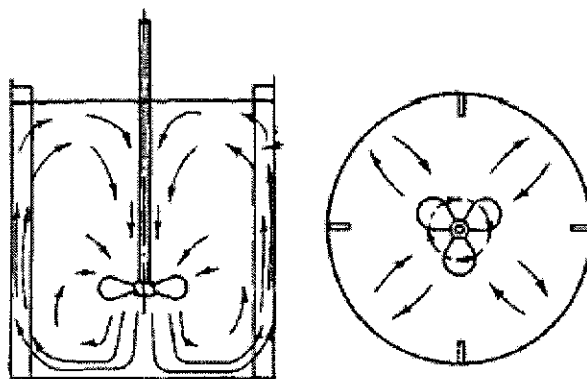


Figura No. 24: Patrones de flujo presentados por recipientes agitados axialmente con deflectores

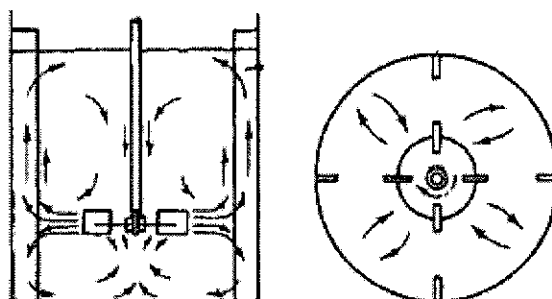


Figura No. 25: Patrones de flujo presentados por recipientes agitados radialmente con deflectores

Además, debe de considerarse como una regla gruesa, que para fluidos relativamente viscosos, los agitadores de paletas proveerán de mayor homogeneidad si se trabaja con seis aspas inclinadas y velocidades de giro moderadas.

Ahora bien, conociendo que se tendrá un agitador de propela de paletas inclinadas, debe de estimarse el tamaño de los deflectores, que deben de encontrarse en toda la parte cilíndrica del reactor. Lo primero a hacer es fijar la altura de las placas deflectoras, que debe de ser del alto del cilindro a construir, es decir, de 2.62m; al mismo tiempo, que se recomienda para los sistemas de agitación axial de paletas, un mínimo de cuatro placas deflectoras. Luego, se procede a fijar el ancho de las placas deflectoras, para este efecto, se emplea la siguiente fórmula obtenida de (Perry R. 1997):

$$\text{Ancho} = \frac{D_R}{12} \quad (145)$$

donde  $D_R$  representa el diámetro del reactor a construir. Por lo que empleando los datos calculados para el reactor anteriormente, se puede encontrar el ancho de las placas deflectoras, como se muestra a continuación:

$$\text{Ancho} = \frac{1.94 \text{ m}}{12} = 0.162 \text{ m}$$

Otra aproximación obtenida de la misma fuente es que las placas deflectoras no deben de estar pegadas directamente a la pared del reactor o recipiente agitado, para evitar la acumulación de material, de modo que la separación entre el reactor y las placas deflectoras, se estima por medio del diámetro del reactor, de la siguiente manera:

$$\text{Separacion} = \frac{D_R}{24} \quad (146)$$

De modo que empleando de nuevo los datos calculados para el reactor, se obtiene:

$$\text{Ancho} = \frac{1.94 \text{ m}}{24} = 0.081 \text{ m}$$

A continuación, se procede al diseño de los tamaños de paleta necesarios en la propela a construir para el reactor agitado. Para este cálculo, debe de basarse en que se trata de un agitador de 6 paletas inclinadas a 45°, de donde se obtiene una estimación del diámetro de la turbina, por medio de la siguiente ecuación (Perry, 1997):

$$D_T = D_R \times 0.6 \quad (147)$$

donde  $D_T$  es el diámetro de la propela a construir. Entonces, empleando de nuevo el dato del diámetro del reactor, se obtiene:

$$D_T = 1.94 \text{ m} \times 0.6 = 1.16 \text{ m}$$

De donde cada paleta debe de tener claramente 0.58m de ancho. Ahora bien, para calcular el alto de las paletas, es necesario el emplear otra ecuación parecida a las anteriores, en función del diámetro de turbina, la cual se muestra a continuación:

$$h_T = \frac{D_T}{8} \quad (148)$$

De modo que empleando el diámetro de la propela anteriormente calculado, se obtiene:

$$h_T = 1.16 \text{ m} / 8 = 0.146 \text{ m}$$

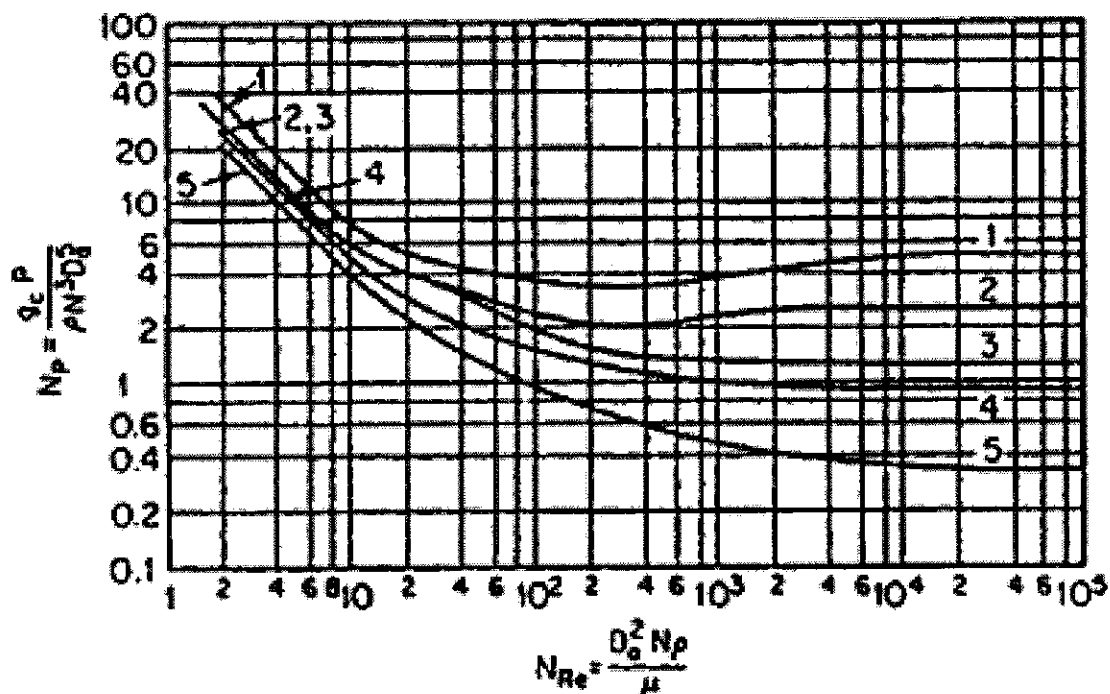
Luego de esto, puede calcularse la ubicación que debe de tener el agitador dentro del reactor, que se estima en muchos casos como la mitad del diámetro del recipiente a emplear, sin embargo, debido a la forma suavizada del recipiente, se decidió colocar el agitador un poco más arriba, aproximadamente a una distancia igual a tres cuartos del diámetro del reactor, sobre la base de este mismo. Es decir, a 1.46 m de la base del reactor.

El alto del eje del agitador, debe de tener la capacidad de llevarlo hasta el fondo del mismo, ya que esto le conferirá una ventaja de soporte y versatilidad de operación, de donde el alto del eje se estima como la altura total del reactor, es decir, de 4.56 m. Mientras tanto, el diámetro del eje, también puede estimarse a partir del diámetro de la propela, como aproximadamente el 2% de este diámetro, con lo que se obtiene un eje de 0.05 m de diámetro.

Pero el sistema de agitación, también consta de un motor, y un sistema de transmisión de potencia y reducción de velocidad. El sistema de reducción de velocidad, deberá de hacerse por medio de un sistema de engranes de gran tamaño, que tiende a ser caro, o bien, por un sistema de poleas, que puede bajar un poco la eficiencia de transmisión de potencia. Este sistema es importante, dado que los motores de gran tamaño giran a velocidades considerables, que provocarían consumos muy grandes de energía, si se pudieran emplear

directamente los motores sobre el agitador; al mismo tiempo que la agitación podría ser muy vigorosa y el sistema mecánico requeriría de sistemas especiales de resistencia de materiales.

El motor por su lado, puede dimensionarse a partir de la Gráfica No. 10 (Perry, 1997).



Gráfica No. 10: Números de potencia de sistemas agitados, en función del número de Reynolds manejado

En esta figura, se muestran los números de potencia de diferentes sistemas de agitación en función del número de Reynolds. De modo que lo primero para estimar la potencia a consumir en el sistema, es el cálculo del número Reynolds, cuya fórmula es:

$$Re = \frac{D_a^2 N \rho}{\mu} \quad (149)$$

donde  $D_a$  es el diámetro de la propela utilizada,  $N$  es la velocidad de giro del agitador (en r/s),  $\rho$  es la densidad de la pasta a manejar y  $\mu$  es la viscosidad a emplear.

Entonces, utilizando los datos calculados y los mostrados en la Tabla No.9 para las especificaciones de la pasta, se obtiene:

$$Re = \frac{(1.16 \text{ m})^2 \left( 140 \text{ rpm} \times \frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \right) (1300 \text{ kg/m}^3)}{5.0 \text{ Pa s}} = 1219$$

La velocidad de giro del agitador, se estima de (Perry, 1997), donde se especifica que para materiales con viscosidad considerable, se debe de manejar velocidades de 80 a 160rpm, escogiendo 140rpm como velocidad de giro.

En la gráfica No. 10, puede emplearse la curva No.3, dado que es la que representa un sistema de seis paletas inclinadas a  $45^\circ$ , con lo que localizando el número Reynolds calculado, se obtiene un resultado de 1.5 para el número de potencia. Ahora bien, para calcular la potencia necesaria, es necesario el despejar de la ecuación del número de potencia, tal y como se muestra a continuación:

$$N_p = \frac{g_c P}{\rho N^3 D_a^5} \quad (150)$$

Y despejando:

$$P = N_p \rho N^3 D_a^5 / g_c \quad (151)$$

donde P es la potencia a emplear en el sistema, y  $N_p$  es el número de potencia.

Entonces, empleando los datos del número potencia, velocidad de giro y diámetro de la propela, se obtiene:

$$P = 1.5(1300 \text{ kg} / \text{m}^3)(140 \text{ rpm} \times 1 \text{ min} / 60 \text{ s})^3 (1.16 \text{ m})^5 = 55015 \text{ W}$$

Y empleando un factor de seguridad del 30%, para amortiguar los errores acarreados por el cálculo y las pérdidas de potencia de la reducción de velocidad, se obtiene finalmente un motor requerido de 100 hp o 74.6kW.

Finalmente, en lo que se refiere al sistema de enfriamiento, debe de decidirse entre serpentines o chaqueta de enfriamiento. En este caso, se ha optado por el cálculo de una chaqueta de enfriamiento alrededor de todo el reactor, parecida al sistema mostrado en la siguiente figura:

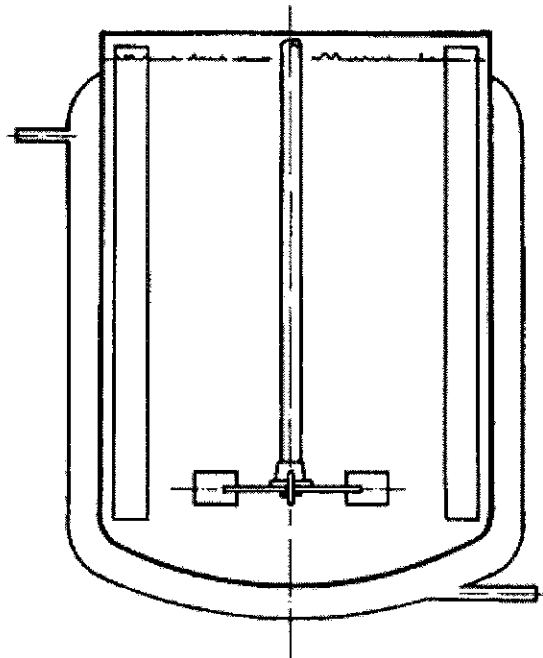


Figura No. 26: Sistema de enfriamiento con chaqueta

Para el cálculo, es necesario primero el estimar el área por medio de la que se llevará a cabo la transferencia de calor, lo cual se hace por medio de la suma del área de una esfera (por las formas superior e inferior en el reactor) y la forma cilíndrica. Estas fórmulas se muestran a continuación:

Para el cilindro:

$$A = Ph = \Pi Dh \quad (152)$$

donde A representa el área del cilindro, P es el perímetro de la circunferencia base y h la altura del cilindro.

Para la esfera se tiene:

$$A = \Pi D_R^2 \quad (153)$$

donde  $D_R$  es el diámetro del reactor.

Entonces, empleando los datos de diámetro del reactor y de la altura del cilindro construido, se obtiene un área total de transferencia de calor de  $27.8 \text{ m}^2$ .

A continuación, es necesario el empleo de una ecuación adimensional diseñada para los tanques agitados con un sistema de paletas como el que se empleará en el reactor, de modo que se pueda estimar el número Nusselt y de esta manera calcular el coeficiente parcial de transferencia de calor. La ecuación adimensional a emplear es la siguiente:

$$\frac{hD_j}{k} = a \left( \frac{L_p^2 N_r \rho}{\mu} \right)^b \left( \frac{c\mu}{k} \right)^{1/3} \left( \frac{\mu_b}{\mu_w} \right)^m \quad (154)$$

donde a, b y m son variables que dependen del sistema de agitación empleado (Perry R. 1997), el término elevado a la b, representa el número Reynolds del sistema; el término elevado a la 1/3 representa el número de Prandtl, y el que se encuentra elevado a la m, representa la corrección por viscosidad. De (Perry R. 1997) se obtiene que  $a = 0.54$ ,  $b = 2/3$  y  $m = 0.14$ .

De modo que empleando los valores de las variables encontradas, y empleando una corrección con la viscosidad objetivo cerca de la pared y la viscosidad mínima en el sistema, que es el peor de los casos, se obtiene un número de Nusselt con el siguiente valor:

$$Nu = 0.54 Re^{2/3} Pr^{1/3} \theta^{0.14} = 136.5$$

Sin embargo, el número Nusselt también se define como:

$$Nu = \frac{hD_R}{k} \quad (155)$$

donde h es el coeficiente de transferencia de calor y k es la conductividad de la pasta. De modo, que con un valor obtenido del centro de tecnología de la empresa, se puede calcular el coeficiente de transferencia de masa, de la siguiente manera:

$$h = \frac{Nuk}{D_R} = \frac{136.5 \times 10.7 \text{ W/(m K)}}{1.94 \text{ m}} = 753 \text{ W/(m}^2 \text{ K)}$$

De modo que el flujo de calor capaz de extraer con la chaqueta de enfriamiento, se puede estimar de la siguiente manera:

Conociendo que el sistema de agua se encuentra suministrando a 16°C, puede estimarse un flujo de salida de agua a 20°C, que aún pueda emplearse en otro proceso, de modo que se tenga una temperatura promedio del agua de enfriamiento de 18°C. Entonces, conociendo que la temperatura de operación del reactor es de 65°C, se obtiene:

$$Q = hA\Delta T = (753 \text{ W / (m}^2 \text{ K)})(27.8 \text{ m}^2)(65^\circ\text{C} - 18^\circ\text{C}) = 984 \text{ kW}$$

Esto, asumiendo que la resistencia de las paredes de acero inoxidable es despreciable.

Con este calor intercambiado, puede calcularse el flujo de agua máximo necesario en el sistema, por medio de las temperaturas estimadas a manejar. Esto se lleva a cabo por medio de la capacidad calorífica de la siguiente manera:

$$m = \frac{Q}{C_p\Delta T} = \frac{984 \text{ kW}}{4.18 \text{ J / (g }^\circ\text{C)} \times (20^\circ\text{C} - 16^\circ\text{C})} = 58.8 \text{ kg / s}$$

Y desde luego, debe de comprobarse que la extracción de calor del sistema de enfriamiento, es suficiente para eliminar el calor producido y que la temperatura permanezca constante dentro del reactor. Para este cálculo, puede emplearse los calores estándar de reacción, que se calcularon anteriormente, de modo que el calor a perder, debe de ser igual a las entalpías de reacción por los moles que reaccionan. Esto se muestra en la siguiente fórmula:

$$Q_s = \Delta H_n n + \Delta H_d d \quad (156)$$

donde  $Q_s$  representa el calor a extraer,  $\Delta H_n n$  representa la multiplicación del calor estándar de neutralización por el número de moles de ácido neutralizados y  $\Delta H_d d$  la multiplicación del calor estándar de disolución por el número de moles de soda disueltos.

Entonces, ingresando los datos calculados con anterioridad, se obtiene:

$$Q_s = 1.37 \text{ mol / s} \times 475.44 \text{ kJ / mol} + \frac{0.81 \text{ kg / s} \times 10.1 \text{ kJ / mol}}{29 \text{ g / mol}} \times \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} = 693.5 \text{ kW}$$

Con lo que la chaqueta diseñada tiene una capacidad mayor que la requerida en el sistema para el enfriamiento.

Además, es necesario el diseñar la soportaría que debe emplearse en el equipo diseñado. En este caso, es necesario el basarse en las técnicas principales de anclaje y soporte que se tengan en cada lugar. En la compañía donde se realizó el estudio, se tiene como principal regla, que los equipos de capacidad mayor a los 200 kg, deben tener un sistema seguro de soporte, pero a la vez garantizar que no puedan moverse horizontalmente, para evitar accidentes o esfuerzos dispares en los soportes del equipo.

De este modo, puede analizarse el lugar, en el que se colocará el reactor, el cual se puede observar más claramente en la Figura No. 15. El lugar es una torre de secado de detergente, que tiene el espacio suficiente

como para albergar al reactor en el medio de dos de los pisos de la torre, cuyas alturas son de 3.2 m. Con esto, se tiene un espacio disponible de 6.4 m de altura para el reactor, que mide en total 4.5 m.

Luego de analizado el espacio, tiene que considerarse que en el lugar ya se cuenta con estructuras de soporte, que tienen una capacidad de carga de más de 6000 toneladas, que en las condiciones de operación actual se encuentra carga a la mitad de esta capacidad, con lo que la instalación del reactor, con 10 toneladas de carga máxima, no debería de representar ningún problema para el soporte general de la torre.

Ahora bien, conociendo que el reactor debe quedar en el medio de dos pisos, puede emplearse la estructura de vigas H, disponibles entre los pisos de la torre, como soporte y anclaje horizontal. Dichas vigas se encuentran separadas 2.2 m en la torre de detergentes, por lo que la instalación del reactor no debería presentar problema. De este modo, debe de emplearse lámina de la utilizada en la construcción del reactor, soldada y deformada, de modo que forme un soporte firme adherido al reactor, que pueda unirse a las vigas H, por medio de pernos.

Sin embargo, no sería aconsejable tener el reactor sostenido únicamente de estas vigas, por lo que se busca el soporte vertical. En este caso, se propone el emplear soportes como los del equipos de preparación de cargas por lotes, que tienen cuatro soportes de hierro de 0.2 m de ancho, los cuales, según se muestra en la tabla No. 29 (Pág. No. 72), en la configuración de cuatro patas externas, pueden soportar hasta 35000 kg. Entonces, calculando la capacidad de carga máxima del reactor, se obtiene:

$$\text{Carga} = \text{Volumen reactor} \times \text{Densidad de la Pasta} = (8.11 \text{ m}^3) (1300 \text{ kg/m}^3) = 10945 \text{ kg}$$

Con lo que los soportes verticales resistirán completamente el peso máximo que puede tenerse en el reactor y los horizontales le conferirán una seguridad extra de anclaje y soporte.

Ahora bien, las distancias verticales a las que se encontrará el reactor, dependen de dos factores, que son el tamaño de los sistemas auxiliares que se colocan principalmente en la parte superior, y el mantenimiento de la descarga. Debido a este último punto, se decidió el tener 0.5 m en la parte inferior (esto se tomó en cuenta en los soportes) y el resto en la parte superior, dejando suficiente espacio para equipos y mantenimiento.

3. **Determinación de los costos de maquinaria y equipo:** Para estimar los costos de compra de equipo, se emplean gráficas proporcionadas por la revista Chemical Engineering (Perry, 1997), donde se puede encontrar el precio en función de la capacidad del equipo. Es decir, que por ejemplo, para el reactor de 1.94 m de diámetro y una altura de 4.59 m, se puede leer que el precio de compra del equipo en 1982, era de Q 80,000.00.

Ahora bien, como el reactor es de acero inoxidable, debe de incluirse un factor de material, que según la misma referencia, para el acero inoxidable en tanques agitados es de 4. De manera que en la misma referencia se encuentran gráficas que indican el factor de módulo simple en función de la multiplicación del factor de material y el factor de presión. Como el reactor funciona a presión ambiental, el factor de presión es 1.

De modo que leyendo en la gráfica, puede obtenerse un factor de módulo simple de 7 para el factor de material empleado. Además, en la misma referencia, deben manejarse los índices de costos, que relacionan el precio obtenido en el año dado, con el precio en el año actual.

De esta forma, para el cálculo del costo del reactor, el cálculo efectuado es el siguiente:

$$\text{Costo} = C_p \times FBM \times \frac{I_{2004}}{I_{1982}} = Q 80,000.00 \times 7 \times \frac{405.7}{315} = Q 721,244.44 \quad (157)$$

Estos son los costos del equipo, incluyendo el transporte e instalación.

Ahora bien, a partir de esta estimación de los equipos principales, se obtiene un subtotal, al cual según el método de estimación de costos, debe de agregársele un 15% de instalaciones eléctricas y tuberías, y un 20% de automatización e instrumentación. Todo este costo sumado, representa lo que se denomina Costo de módulo simple. Luego, se calcula el costo de módulo total, que es el Costo de módulo simple, pero con un 18% extra de imprevistos y Honorarios. Y finalmente, la inversión en el capital total, se estima como el Costo de módulo total más un 15% de las instalaciones auxiliares utilizadas en la instalación del equipo. Con esto, la inversión de capital necesaria para el reactor, es de Q 3,722,347.

Por último, debe mencionarse que el otro método de obtener los costos, es el método directo, que obtiene costos directamente de cotizaciones de los proveedores. Al utilizar este método, se obtiene el costo de compra de equipo, más no el de instalación. Los resultados del costeo efectuado con proveedores, se muestran en la Tabla No.52.

4. Cálculo del tiempo necesario para la recuperación de la inversión: En la determinación del tiempo de recuperación de la inversión, es necesario el calcular dos variables principalmente, que son: los beneficios económicos a obtener con la instalación del reactor, y todos los costos que implica el utilizar el equipo diseñado.

El monto de beneficios totales por período de tiempo, obtenidos al emplear el reactor, se calcula de manera sencilla, calculando los costos en los que se incurre de manejo de materiales actualmente, los costos actuales de mano de obra empleada y los costos del tratamiento de los desechos generados actualmente en el proceso. Entonces, teniendo las cantidades mensuales promedio de variación y los costos unitarios de los materiales, puede calcularse un costo mensual de empleo de materiales extra, derivados del sistema poco controlado de reacción, que se tiene actualmente. Esto se lleva a cabo con la siguiente fórmula:

$$\text{Costo de empleo del material} = \text{costo unitario} \times \text{Cantidad empleada} \quad (158)$$

De modo, que al sumar todos estos costos de empleo extra de materiales, se puede calcular un total mensual o anual, que permite la obtención de un beneficio económico de materiales, del empleo del reactor continuo agitado.

El cálculo de los costos mensuales del tratamiento de los desechos generados por causa del control inadecuado de las reacciones, puede realizarse con la ecuación (158), ya que se tiene un monto del costo unitario del tratamiento de los desechos, pero al mismo tiempo se cuenta con un dato de la cantidad de producción rechazada mensualmente. Los datos calculados pueden observarse en la Tabla No. 55.

Y por último, se puede realizar el cálculo de los ahorros de mano de obra que se obtienen con la instalación del reactor continuo agitado. Esto puede realizarse a partir de las cantidades de personal que se necesitan en el proceso actualmente por turno, y las cantidades necesarias en el proceso que emplea el reactor continuo agitado.

De modo, que puede emplearse la siguiente fórmula para realizara el cálculo de los costos que se ahorran en mano de obra:

$$\begin{aligned} \text{Costo de la mano de obra} &= \text{Número de operadores} \times \text{horas hombre trabajadas en un turno} \\ &\quad \times 3 \text{ turnos/ 1 día} \times \text{costo de la hora hombre} \times 22 \text{ días/1mes} \\ &\quad \times 12 \text{ meses/ 1 año} \end{aligned} \quad (159)$$

Con lo que empleando los datos mostrados en la Tabla No.31, para los operadores empleados en el proceso actual de nivel 1, se obtiene:

$$\begin{aligned} \text{Costo de la mano de obra} &= 40 \text{ hombres} \times 8 \text{ h/ turno} \times 3 \text{ turnos/ 1 día} \times Q 11.36/\text{h} \\ &\quad \times 22 \text{ días/1 mes} \times 15 \text{ salarios/ 1 año} \\ &= Q 3600000.00 / \text{año} \end{aligned}$$

De modo que sumando los salarios de los empleados utilizados en el proceso actual y luego, restando la suma de todos los empleados a utilizar con el reactor continuo agitado, se obtiene el ahorro en mano de obra por año, que se muestra en la Tabla No. 55.

Ahora bien, buscando obtener un tiempo de recuperación de la inversión, pero sobre un préstamo, debería de efectuarse un análisis de los montos anuales de inflación y de intereses, que darían como resultado final, el tiempo en el que se pagaría la deuda, al contraer el préstamo.

Sin embargo, en la empresa donde se llevó a cabo del estudio, se tienen los recursos suficientes, como para implementar de inmediato. Desde luego, que por este motivo, puede asumirse que la totalidad de beneficios mensuales a obtener con la instalación del equipo, se usarán para saldar en precio o costo del equipo, es decir, que la fórmula a emplear es la siguiente:

$$\text{Tiempo de recuperación} = \text{Costo del equipo} / \text{Beneficios anuales} \quad (160)$$

Donde los beneficios anuales son simplemente, la suma de los beneficios de mano de obra, de ahorro de materiales y ahorro de tratamiento de desechos, que se calcularon previamente.

De modo que empleando los datos calculados, mostrados en las Tablas No.8 y 55, se obtiene:

$$\text{Tiempo de recuperación} = (Q 3722347.93) / (Q 6440006.24/\text{año}) = 0.58 \text{ años}$$

5. Consideraciones de automatización del equipo: A pesar de que el presente estudio no presenta cálculos sobre la automatización del proceso en el que se emplea el reactor continuo agitado, es importante resaltar, que tanto la operación automática como manual, son factibles en el reactor. La operación automática, puede simplificarse por medio de la compra de equipos compatibles, que sean producidos bajo normas internacionales.

Es por esto, que en la elección de los medidores de flujo, de temperatura y nivel, se deben emplear especificaciones del proveedor, que cumplan con las normas de conectividad abierta o libre, permitiendo que cuando se posean los recursos para la automatización del equipo, este proceso sea eficiente y eficaz. Probablemente, la solución final, sea un reactor totalmente automatizado via Computadora Personal, con un software del tipo Scada, que permita la interconexión de todos los sensores y actuadores.

De este modo, es que los medidores seleccionados, se encuentran escogidos a manera que sean capaces de responder a este tipo de programas de control o a PLC (controladores lógicos programables). La Figura No.16,

muestra un esquema aproximado de lo que podría ser el reactor con los dispositivos de control básicos que debería de tener.

Entonces, también es importante que las válvulas de control colocadas en las entradas de materiales, sea compatibles con la automatización futura, a modo de poder graduar el flujo y no solamente controlar su paso.

Finalmente, es necesario mencionar, que las variables a controlar en el reactor, son principalmente la temperatura, la agitación y los flujos de entrada de materiales. Todas estas variables deben de ser constantes, exceptuando el caso del arranque y de los paros. Y para cada una de estas variables, deben de desarrollarse ciclos de revisión, que permitan la variación de los actuadores, cuando una de las variables se encuentre fuera de rango.