

Absorción de CO₂ en una columna empacada

Transferencia de masa y reacción química simultánea

1.- PROBLEMA

Para iniciar el estudio de la absorción en presencia de reacciones químicas en el Laboratorio de Ingeniería Química, se pide a los alumnos experimentar en la torre de absorción PIGNAT y utilizar el siguiente sistema (MEA/H₂O-CO₂/AIRE) en el que la transferencia de masa del bióxido de carbono produce una reacción química exotérmica de 2° orden. Para comparar los resultados que produce este sistema, alimentar tres flujos de monoetanolamina-agua (5, 8, y 10) L/h con un flujo de alimentación constante de bióxido de carbono-aire.

Contestar el siguiente cuestionario:

1. Encontrar el mayor tiempo de residencia de la mezcla líquida de (MEA-H₂O) de uno de los siguientes flujos alimentados (5, 8 ó 10) L/h, ya que para este proceso interesa la formación de los productos de reacción, los iones carbámico (R_1NHCOO^-) y los iones amina ($R_1NH_3^+$).
2. ¿Cuál es el valor del coeficiente volumétrico individual y temporal de transferencia de masa con reacción química $k_L r a = k_L a \times E$, a diferentes alturas de la columna desde la base al domo de la columna.
3. El mecanismo controlante (el más lento) entre la difusión o la reacción en la fase líquida descendente.
- 4.- El sitio donde se da la reacción, (en la película del líquido o en el seno de la fase líquida).
- 5.- El régimen de reacción

Las condiciones de alimentación son:

- Una solución al 15% en masa de MEA/AGUA para la fase líquida y una mezcla al 15% en masa de CO₂/AIRE para la concentración de la fase gaseosa, utilizar los siguientes valores en las escalas de los rotámetros instalados en la torre:

$$\left\{ \begin{array}{l} 20 \% \text{ de aire} \\ 50 \text{ mm de CO}_2 \end{array} \right. \rightarrow \text{da una concentración en el entorno de } 15.22\% \text{ en masa}$$

- Trabajar la torre utilizando sus empaques de vidrio tipo Raschig de 1/2" de diámetro nominal, y condiciones no isotérmicas y no adiabáticas.
- Aplicar en este estudio experimental el modelo de la película.

2.- PARTE EXPERIEMNTAL

2.1 MATERIALES

- 1 Bureta con soporte universal
- 4 vasos de precipitados de 100 mL
- 4 matraces Erlenmeyer
- 2 pipetas de 3 mL
- 1 propipeta
- 1 termómetro de vidrio
- 1 Probeta de 100 mL
- Una computadora
- Un sensor para bióxido de carbono (CO₂)
- Una extensión de cables eléctricos
- La libreta N° 3 de la bitácora del Laboratorio de Ingeniería Química III

2.2 SUSTANCIAS

- 1 recipiente de plástico con monoetanolamina-agua al 15% en masa
- Ácido clorhídrico 1N
- Frasco gotero con Fenolftaleína.

2.3 SERVICIOS AUXILIARES

- Energía eléctrica
- Aire de compresora
- Tanque de bióxido de carbono extraseco

2.4 DESCRIPCIÓN DEL EQUIPO

EQUIPO	ESPECIFICACIONES
Columna empacada	Servicio: Absorción o desorción Operación: Contracorriente Diámetro interno: 5.08 cm Altura empacada: 106 cm Material de construcción: Vidrio Empaque: Anillos Raschig de vidrio de 0.703 cm de diámetro externo, 0.545 cm de diámetro interno y 0.854 cm de longitud Plato de soporte: Acero inoxidable
Tanque de alimentación	Capacidad: 30 litros Lado: 30 cm Altura: 50 cm Material de construcción: Polietileno
Bomba de desplazamiento positivo	Tipo: Dosificadora Accionador: Motor eléctrico a 110 Volts Material de construcción: PTFE (teflón)
Tanque receptor	Servicio: Recibe solución diluida Capacidad: Un litro Diámetro: 8 cm Altura: 45 cm Mat. de construcción: Vidrio, acero inox.
Pierna barométrica	Servicio: Igualar nivel
Tanque receptor	Servicio: Descarga de producto

	Capacidad: 3 litros Diámetro: 13 cm Altura: 50 cm Material de construcción: Vidrio, acero inoxidable.
Manómetro diferencial	Servicio: Indicador de la diferencia de presión de la columna

2.5 DIAGRAMA y FOTOGRAFÍA

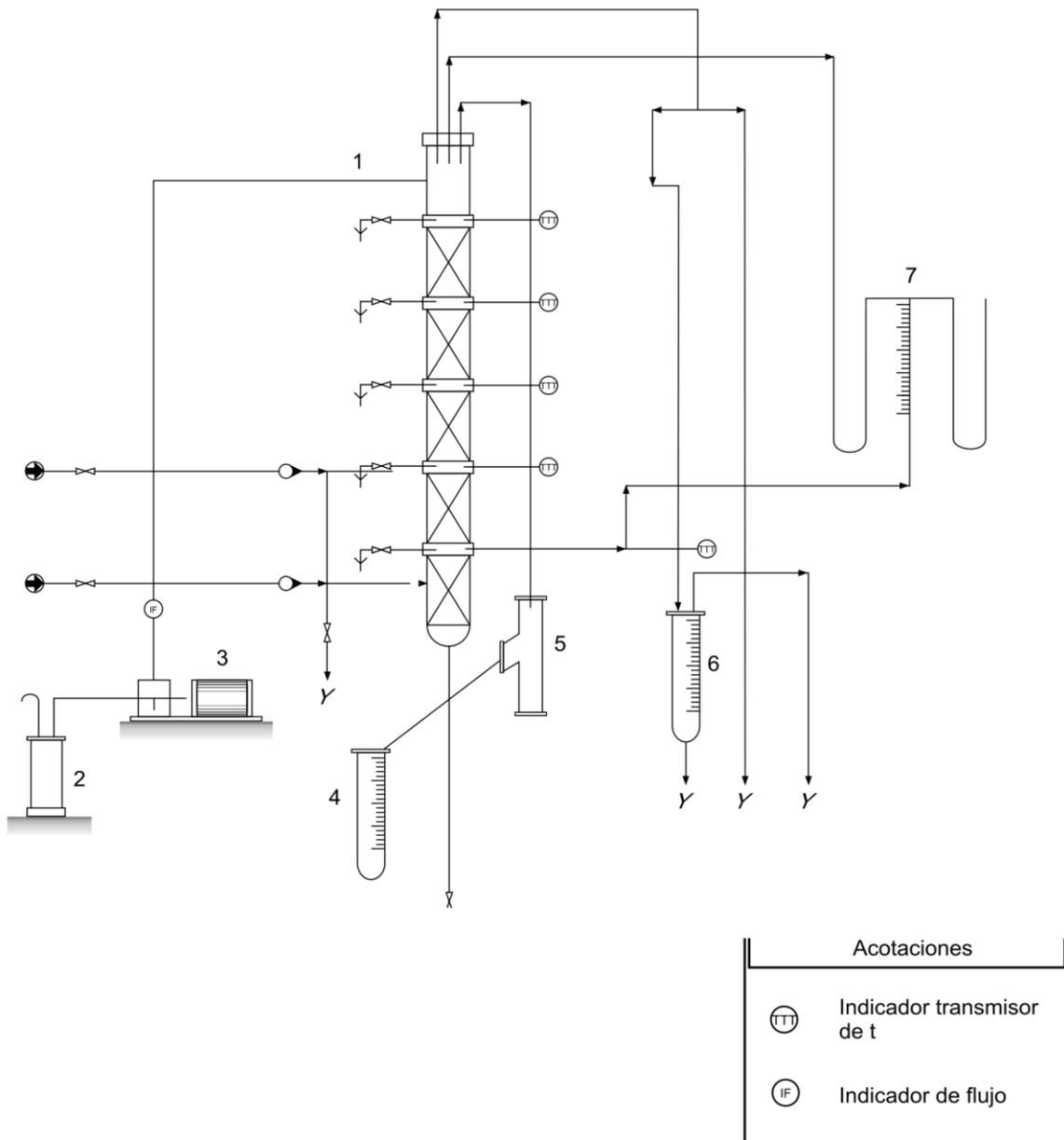


Figura 1 Diagrama del reactor absorbedor

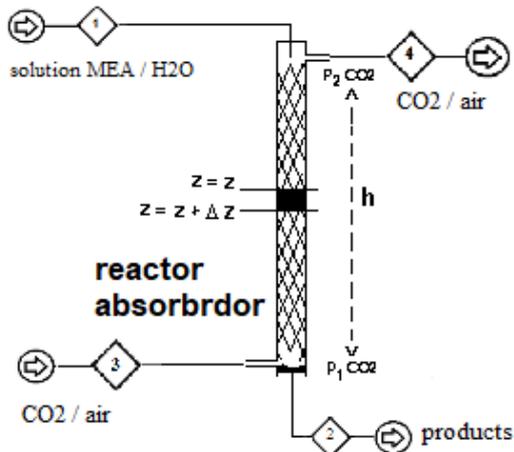


Figura 2

El equipo tiene las siguientes especificaciones

Diámetro interno de la columna: 5.08 cm
 Área interna de la columna: 20.268 cm²
 Altura empacada: 106 cm
 Área transversal de flujo entre empaques = 14.66 cm²
 Material de construcción: Vidrio
 Empaque: Anillos Raschig de vidrio de 0.703 cm de diámetro externo, 0.545 cm de diámetro interno y 0.854 cm de longitud
 Cromatógrafo GowMac de conductividad eléctrica



Figura 3
Torre de absorción marca PIGNAT en el Laboratorio de Ingeniería Química

2.6 MEDIDAS DE HIGIENE Y SEGURIDAD

- a) Utilizar lentes de seguridad para el manejo de HCl
- b) Verificar que el regulador de aire colocado en el equipo opere con una presión de 1 bar

2.7 DESARROLLO EXPERIMENTAL

Arranque del equipo

- 1.- Consultar el instructivo de operación del sensor de bióxido de carbono pegado en el gabinete del cromatógrafo, para determinar las composiciones en por ciento en masa del CO₂ en aire.
- 2.- Consultar el anexo A para conocer la forma de evaluar los flujos en los rotámetros de la mezcla líquida de MEA-H₂O, el flujo aire y de CO₂.
- 3.- Arrancar la compresora del laboratorio y recorrer visualmente la línea de aire que llega hasta la válvula de la entrada a la columna.

- 4.- Purgar el aire que proviene de la compresora antes de alimentarlo a la columna, para lograrlo abrir la válvula que permite la descarga a la atmósfera, después fijar una presión de 1 bar en la carátula de la válvula reguladora de aire que alimenta a la columna.

Operación del equipo

- 1.- Alimentar aire y controlar el flujo con la válvula del rotámetro a un valor constante entre 20 a 25% de la escala. Medir su temperatura abriendo la válvula ubicada antes de la entrada al equipo y apuntar la lectura en la Tabla de Datos Experimentales.
- 2- Abrir la válvula principal del tanque de CO₂, después controlar la válvula de descarga ubicada en el tanque a 20 psig.
- 3.- Alimentar CO₂ a la columna, y controlar el flujo con la válvula del rotámetro de entrada a un valor constante entre 30 a 40 mm en la escala. Medir su temperatura abriendo la válvula ubicada antes de la entrada al equipo y apuntar su valor en la Tabla de datos Experimentales.
- 4.- Determinar por cromatografía la composición de la corriente gaseosa de entrada a la columna, llenar la Tabla de datos Experimentales.
- 5.- Verificar que el tanque de alimentación que contiene la solución de MEA se encuentre aproximadamente al 15% en masa, para esto tomar 3 alícuotas de 4 mL y adicionar 2 gotas de fenolftaleína a cada una, titular con HCl 1 N, tomar el promedio y llenar la Tabla de datos Experimentales
- 6.- Tomar la temperatura de la solución de MEA-H₂O y apuntarla en la Tabla de datos Experimentales
- 7.- Conectar a la energía eléctrica la bomba peristáltica de alimentación de solución de MEA-H₂O. Observar la parte frontal de la bomba y operar la perilla del llenado del pistón y las flechas para las pulsaciones de acuerdo al flujo de líquido que se desea alimentar. Experimentar 3 flujos diferentes entre 5 a 10 L / h por ejemplo 5, 8 y 10 L / h de mezcla. Llenar la Tabla de datos Experimentales con los valores de los flujos seleccionados.
- 8.- Alimentar simultáneamente el flujo de la corriente gaseosa seleccionada y mantenerla constante para cada uno de los flujos seleccionados de monoetanolamina y agua
- 9.- Determinar por cromatografía la composición de la corriente gaseosa de salida de la columna, recordar que el flujo de la corriente gaseosa alimentada permanece constante, sólo varía el flujo de la solución alimentada de monoetanolamina. Llenar la Tabla de datos Experimentales con los valores leídos del integrador.
- 10.- Para cada corrida experimental, tomar 3 series de alícuotas de 4 mL de la corriente líquida a la salida de la columna, adicionar 2 gotas de fenolftaleína y titular con HCl de concentración 1 N, promediar los valores de cada alícuota y llenar la Tabla de datos Experimentales

Paro del equipo

- 1.- Cerrar las válvulas de alimentación de aire a la columna y del tanque que contiene bióxido de carbono.
- 2.- Apagar compresora que alimenta aire a la columna

3.- NO cerrar la válvula principal del tanque de helio, consultar en Anexo A para apagar el cromatógrafo

2.8 INFORMACIÓN EXPERIMENTAL

Tabla (1). Datos Experimentales de flujos, temperaturas de los fluidos y concentraciones

Temperatura de la solución = 18 °C		Temperatura del aire = 18 °C				
Fracción de huecos $\varepsilon = 0.6$		Temperatura del CO ₂ = 17 °C				
Área transversal de flujo entre empaques = 12.161 cm ²						
Flujo de alimentación (L / h)	Concentración MEA N = gmol / Lsol		Concentración MEA (% en masa) %masa = 6.037(N) + 0.205 (g MEA / g Solución)		G _{aire} (%)	G _{CO2} (mm)
	Entrada	Salida	Entrada	Salida		
5	2.39	0.956	14.64	5.98	20	50
8		1.285		7.80		
10		1.466		9.06		

...

CO ₂ (% masa)		Aire (% masa)	
Entrada	Salida	Entrada	Salida
14.55	7.86	85.45	92.14
	5.75		94.25
	4.95		95.05

Consultar los incisos 7.4, 7.5 y 7.6 del ANEXO de este guion experimental para examinar los cálculos complementarios para el sistema (MEA/H₂O - CO₂/AIRE)

2.9.- Definición del coeficiente de transferencia de masa

Cuando una sustancia de una mezcla se mueve del seno de una de las fases a la interfase por una diferencia de densidades, de concentraciones o de presiones parciales, el fenómeno se conoce como transporte de masa. Como regla general, el flux de masa N_A es proporcional a la diferencia de concentraciones, es decir, a la diferencia entre la concentración en la interfase C_{Ai} y la concentración en el seno de la fase líquida C_{Ab} .

A la constante de proporcionalidad se conoce como el coeficiente de transferencia de masa

$$N_A = k(C_{Ai} - C_{Ab}) \quad (1)$$

Donde k tiene un índice L ó G dependiendo de si la concentración está en el lado del líquido o gas. La presión parcial casi siempre se usa como una medida de concentración para la transferencia de masa del lado del gas, esto proporciona otras unidades para la nueva constante k_G .

El patrón microscópico que surge de la conocida teoría de la película se basa en la línea de concentración curvilínea real utilizando el modelo aproximado lineal del modelo de la película como se muestra en la Fig. (4)

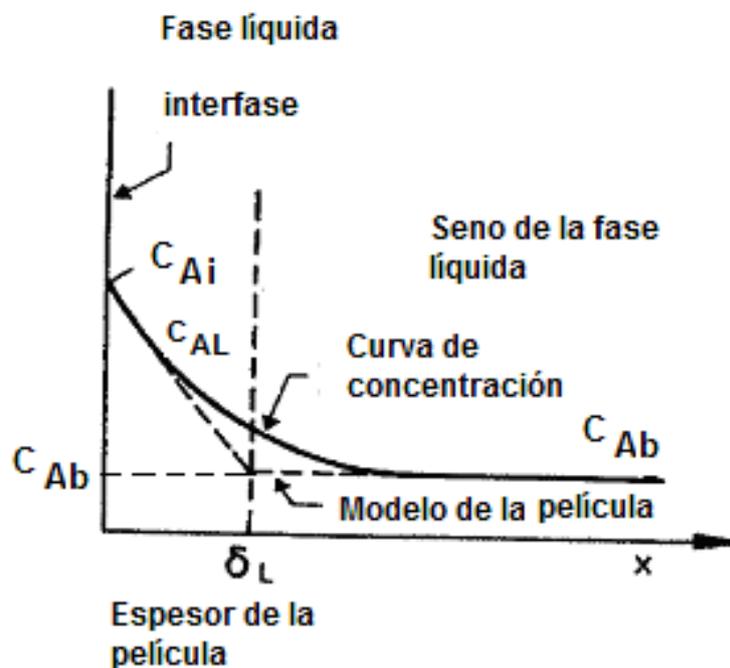


Fig. 4 Curva de concentración experimental y curva del modelo de la película

El coeficiente de transferencia de masa ubicado en el modelo lineal de la película del líquido se define como

$$k_L = \frac{\text{Flux difusivo}}{\text{Diferencia de concentraciones}} = \frac{D_L \frac{dC_{AL}}{dx}}{C_{Ai} - C_{Ab}} \quad (2)$$

Donde C_{AL} es la concentración en la película de líquido en la Fig. 4

$$\frac{dC_{AL}}{dx} = \frac{C_{Ai} - C_{Ab}}{\delta_L} \quad (3)$$

Sustituyendo (3) en (2)

$$k_L = \frac{D_L}{\delta_L} \quad (4)$$

Esta ecuación representa el significado físico del coeficiente de transferencia de masa del lado del líquido.

2.10.- Transferencia de masa a través de la interfase gas-líquido en presencia de reacción química

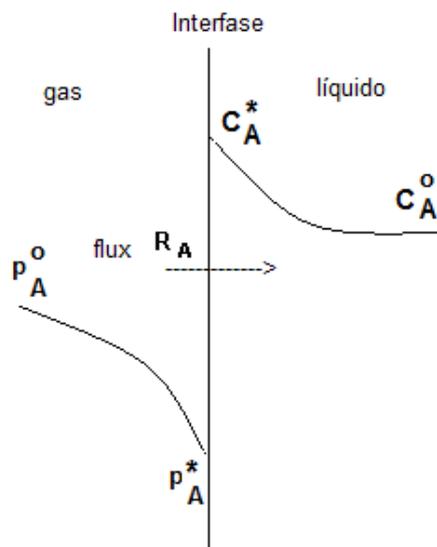


Fig. 5 Transferencia de masa R_A a través de la interfase gas-líquido

La siguiente ecuación representa el flux volumétrico del soluto que arriba a la interfase del lado del gas

$$R_{Ai,G} a = k_G a \left(p_A^o - p_A^* \right) \quad (5)$$

El flux volumétrico del soluto que se transfiere desde la interfase hacia el seno del líquido está dado por

$$R_{Ai,L} a = E k_L a \left(C_A^* - C_A^o \right) \quad (6)$$

Donde a es el área interfacial efectiva de contacto entre fases por unidad de volumen de columna y E es el factor de mejora (Enhancement).

La transferencia de masa entre las fases se da en estado estacionario, por lo que

$$R_{A_i,G} a = R_{A_i,L} a = R_{A_i} a = R_A a \quad (7)$$

Como en la interfase se alcanza instantáneamente el equilibrio las concentraciones de ambas fases están relacionadas por la ley de Henry $p_A^* = H_e C_A^*$, que al sustituirla en la ecuación (5) se obtiene

$$R_{A_i} a = k_g a \left(p_A^o - H_e C_A^* \right) = E k_L a \left(C_A^* - C_A^o \right) \quad (8)$$

Despejando la concentración de soluto en el equilibrio C_A^*

$$C_A^* = \frac{k_g a p_A^o + E k_L a C_A^o}{E k_L a + k_g a H_e} \quad (9)$$

Sustituimos (9) en (6) y después de simplificar términos y de acuerdo con la suposición del modelo de que no hay reacción en el seno del fluido en la fase líquida, $C_A^o = 0$ porque la reacción de segundo orden es rápida, entonces se obtiene:

$$R_{A_i,L} a = E k_L a \left(C_A^* - C_A^o \right)$$

$$R_A a = E k_L a \left(\frac{k_g a p_A^o}{E k_L a + k_g a H_e} \right) = E k_L a (k_g a) \left(\frac{p_A^o}{E k_L a + k_g a H_e} \right) =$$

$$\frac{E k_L a p_A^o}{E k_L a k_g a + E k_L a k_g a H_e} = \frac{p_A^o}{k_g a + H_e E k_L a}$$

Donde el flux de la fase gaseosa a la interfase se reduce a

$$R_A = \frac{p_A^0}{\frac{1}{kg\ a} + \frac{He}{E k_L a}} \times \frac{1}{a} \quad (10)$$

Para conocer el flux con reacción R_A de la Ec. (10), todos los términos de esta ecuación se pueden evaluar: Danckwerst [8] propone la siguiente correlación para el sistema NH_3 / AIRE para evaluar el coeficiente $k_g a$ para CO_2 / aire

$$k_g a = 0.0142 \cdot (G_{MV})^{0.72} \cdot (L_{MV})^{0.38} \cdot \left(\frac{N^{\circ}Sc (NH_3\text{-Aire})}{N^{\circ}Sc (CO_2\text{-Aire})} \right)^{\frac{2}{3}} \cdot \frac{1}{P_{op}}$$

L_{MV} = Masa velocidad de la mezcla líquida: lb / h ft²

G_{MV} = Masa velocidad de la mezcla gaseosa: lb / h ft²

P_{op} = Presión de operación en atmósferas

pero corregida mediante el cociente de los números de Schmidt a los dos tercios $[N^{\circ}Sc (NH_3\text{-Aire}) / N^{\circ}Sc (CO_2\text{-Aire})]^{2/3}$. Para evaluar el coeficiente k_L de transferencia de masa en la fase líquida en presencia de reacción, no se reportan en la literatura estas correlaciones y, solamente se puede evaluar por prueba y error aplicando la Ec. (39).

2.11.- Reacción irreversible de primer orden

Cuando el proceso de absorción se acompaña de una reacción **rápida** de primer orden o segundo orden que con exceso del reactivo absorbente se puede tomar como de pseudo-primer orden, la concentración en el seno del fluido de la fase líquida es igual a cero, y se puede plantear el siguiente balance **dentro de la película del líquido**:

Para un elemento diferencial de volumen dentro de la película del líquido $A \Delta x$ se puede plantear

$$\left(\begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{difusión de} \\ \text{A que entra} \\ \text{en } x \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{difusión de} \\ \text{A que sale} \\ \text{en } x + \Delta x \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{acumulación} \\ \text{de soluto} \\ \text{en } A \Delta x \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Tasa de consumo} \\ \text{de A por} \\ \text{la reacción} \\ \text{química en } A \Delta x \end{array} \right) \quad (11)$$

Pero el tercer término es cero, ya que no hay acumulación en la película del líquido

$$(A j_A)|_x = (A j_A)|_{x+\Delta x} + r_A A \Delta x \quad (12)$$

Donde

$$r_A = k_1 c_A \left[= \right] \frac{\text{gmol de A que se consumen}}{\text{Volumen} \times \text{tiempo}} \quad (13)$$

Dividiendo por el volumen de control y tomando el límite cuando $\Delta x \rightarrow 0$ se obtiene

$$\frac{dj_A}{dx} = -r_A \quad (14)$$

Si sustituimos la primera ley de Fick y la expresión para r_A en la ecuación (14) se obtiene

$$-D_A \frac{d^2 c_A}{dx^2} = -k_1 c_A \quad \text{ó} \quad D_A \frac{d^2 c_A}{dx^2} = k_1 c_A \quad (15)$$

y puede resolverse la ecuación diferencial con las siguientes condiciones a la frontera:

$$\begin{aligned} x = 0 & \quad c_A = c_A^* \\ x = \delta & \quad c_A = 0 \rightarrow j_A = 0 \rightarrow \frac{dc_A}{dx} = 0 \end{aligned}$$

Observar que estas condiciones a la frontera están en base al eje coordenado de la Fig. (4).

$$\frac{d^2 c_A}{dx^2} - \frac{k_1}{D_A} c_A = 0 \quad (16)$$

Aplicando una ecuación auxiliar para esta ecuación lineal homogénea de segundo orden

$$m^2 - a = 0$$

donde

$$\left. \begin{aligned} m_1 &= \sqrt{a} = \sqrt{\frac{k_1}{D_A}} = m \\ m_2 &= -\sqrt{a} = -\sqrt{\frac{k_1}{D_A}} = -m \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Ecuación diferencial lineal homogénea

$$a_0 \frac{d^n y}{dx^n} + a_1 \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + \dots + a_{n-1} \frac{dy}{dx} + a_n y = 0$$

solución

$$y = C_1 e^{m_1 x} + C_2 e^{m_2 x} + \dots + C_n e^{m_n x}$$

Por lo tanto la solución general es:

$$c_A = C_1 e^{m x} + C_2 e^{-m x} \quad (18)$$

Aplicando las condiciones de frontera y resolviendo el sistema de dos ecuaciones algebraicas se obtiene

$$\left. \begin{aligned} C_1 &= \frac{c_A^* e^{-m \delta}}{e^{m \delta} + e^{-m \delta}} \\ C_2 &= \frac{c_A^* e^{m \delta}}{e^{m \delta} + e^{-m \delta}} \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Sustituyendo las constantes en (18) se llega a

$$\left. \begin{aligned} \frac{c_A}{c_A^*} &= \frac{e^{-m \delta(\delta-x)} + e^{m \delta(\delta-x)}}{e^{-m \delta} + e^{m \delta}} \\ \text{pero} \\ \cosh(u) &= \frac{e^u + e^{-u}}{2} \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Remplazando las expresiones anteriores para m y $-m$

$$c_A = c_A^* \left[\frac{\cosh\left(\sqrt{\frac{k_1}{D_A}} \delta_L - \sqrt{\frac{k_1}{D_A}} x\right)}{\cosh\left(\sqrt{\frac{k_1}{D_A}} \delta_L\right)} \right] = c_A^* \left[\frac{\cosh\left(\sqrt{\frac{k_1}{D_A}} \delta_L \left(1 - \frac{x}{\delta_L}\right)\right)}{\cosh\left(\sqrt{\frac{k_1}{D_A}} \delta_L\right)} \right] \quad (21)$$

En la ecuación anterior se ha obtenido un parámetro adimensional conocido con el nombre del No. de Hatta y se representa por $\sqrt{M} = \sqrt{\frac{k_1}{D_A}} \delta_L$

De la Ec. (21) se puede observar que si en el término $\sqrt{\frac{k_1}{D_A}} \delta_L$, se sustituye la ecuación (4)

$$(4) \quad k_L = \frac{D_A}{\delta_L}; \quad k_L^2 = \frac{D_A^2}{\delta_L^2} \quad \text{se llega a:}$$

$$\sqrt{\frac{k_1}{D_A}} \left(\frac{D_A}{k_L} \right) = \sqrt{\frac{k_1 D_A^2}{D_A k_L^2}} = \frac{\sqrt{k_1 D_A}}{k_L} = \sqrt{\frac{\delta_L^2 k_1}{D_A}} \equiv \sqrt{M} = N_0 \text{ de Hatta} \quad (22)$$

Es un número adimensional que representa la comparación de los siguientes mecanismos:

$$\sqrt{M} = \frac{\sqrt{k_1 D_A}}{k_L} = \frac{\sqrt{\delta_L^2 k_1}}{D_A} = \frac{\text{rapidez de reacción en la película}}{\text{rapidez de difusión en la película}}$$

Por lo tanto, otra forma de escribir la ecuación (21) en función del No. de Hatta

Es

$$c_A = c_A^* \left[\frac{\cosh\left(\sqrt{\frac{k_1}{D_A}} \delta_L - \sqrt{\frac{k_1}{D_A}} x\right)}{\cosh\left(\sqrt{\frac{k_1}{D_A}} \delta_L\right)} \right] = c_A^* \left[\frac{\cosh\left(\sqrt{M} \left(1 - \frac{x}{\delta_L}\right)\right)}{\cosh(\sqrt{M})} \right] \quad (23)$$

El número de Hatta al cuadrado $\sqrt{M} = \frac{\sqrt{k_1 D_A}}{k_L} \rightarrow M = \frac{k_1 D_A}{k_L^2}$ se puede analizar como la relación del tiempo de difusión $t_{Dif} = D_A/k_L^2$ al tiempo de reacción $t_R = 1/k_1$, donde para una reacción de primer orden:

<p>Constante de reacción</p> $k = \frac{\left(\frac{gmol}{cm^3}\right)^{1-orden}}{s},$	<p>Difusividad mutua</p> $D_A = \frac{cm^2}{s},$	<p>Coficiente individual de transferencia de masa</p> $k_L^2 = \left(\frac{cm^2}{s} * \frac{1}{s}\right) = \frac{cm^2}{s^2}$
--	--	--

Observar la siguiente figura

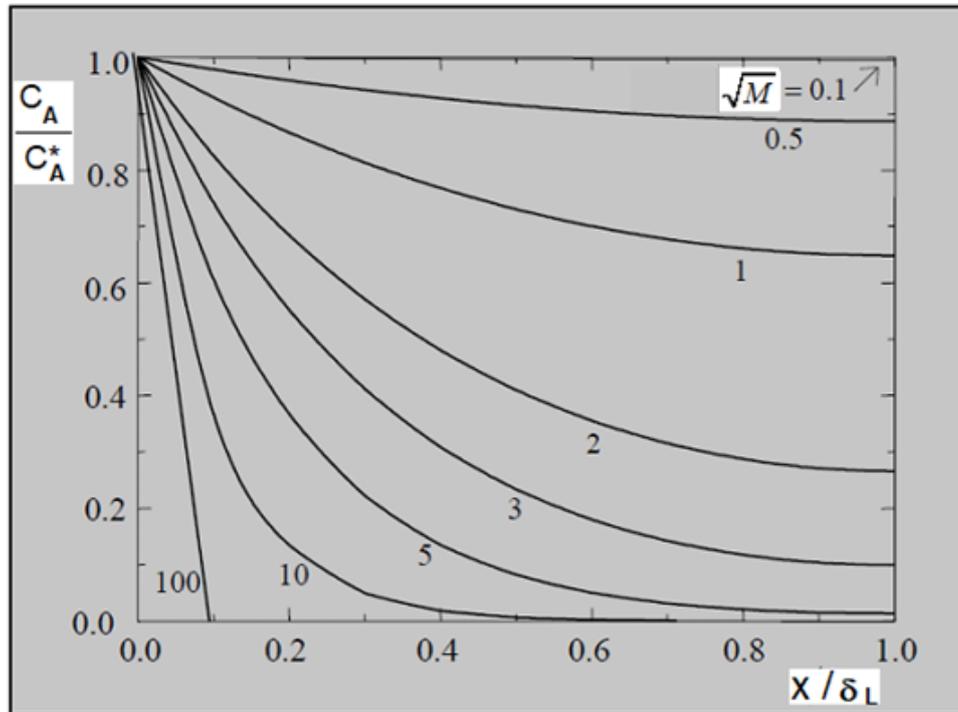


Fig.(6) Perfiles de concentración para la difusión y reacción, mecanismos simultáneos de un soluto en una película

Cuando el No. de Hatta \sqrt{M} es grande querrá decir que la reacción consumirá rápidamente al reactivo que es suministrado por difusión; esperaríamos que los perfiles de concentración fueran muy pronunciados. El mecanismo controlante es la difusión.

Por el contrario, si \sqrt{M} es pequeño, significará que la reacción es lenta comparada con la difusión y, consecuentemente, los perfiles de concentración tenderán a ser planos. El mecanismo controlante es la reacción, esto se puede apreciar en la Fig. (6).

2.12.- Reacciones de segundo orden

En la industria química se pueden encontrar muchos ejemplos importantes de reacciones gas-líquido en las que un componente gaseoso A reacciona con un componente líquido B:



Pueden surgir varias situaciones en la interface y estas se muestran en la Fig. (7)

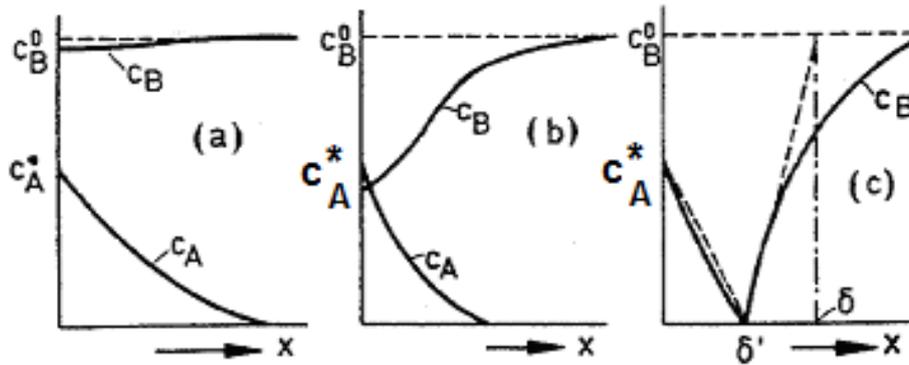


Fig. 7 Posibles perfiles de concentración en la película del líquido para una reacción de segundo orden

Si la concentración de C_B es alta en comparación con C_A , entonces B no se empobrece significativamente en la interface y el caso (a) se reduce a una reacción de pseudo-primer orden. Para el caso general (b), en el que la concentración de C_B declina claramente en comparación con la concentración en que se encuentra en el seno del líquido, pero no llega a cero, la reacción es rápida. El modelo de película produce dos ecuaciones diferenciales acopladas que se pueden resolver numéricamente, **Van Krevelen y Hoftijzer [17]** han proporcionado la siguiente solución en forma implícita para evaluar E.

$$\frac{R_A}{k_L c_A^*} = E = \frac{\left(M \frac{E_i - E}{E_i - 1} \right)^{\frac{1}{2}}}{\tanh \left(M \frac{E_i - E}{E_i - 1} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (25)$$

Significado de términos

$$M = \frac{D_A k_2 C_B^0}{k_L^2} \quad \text{ó} \quad \sqrt{M} = \frac{\sqrt{D_A k_2 C_B^0}}{k_L} \quad (\text{es el No. de Hatta}) \quad (26)$$

C_B^0 = Es la concentración del reactivo B (amina) en el seno del fluido de la fase Líquida en la Ec. (26)

k_2 = Es la constante de velocidad de reacción de segundo orden en la Ec. (26)

E = Es factor de mejora (Enhancement)

$$E_i = 1 + \frac{D_B C_B^0}{z D_A C_A^*} \quad \text{Es el factor de mejora para una reacción instantánea}$$

z = Es el coeficiente estequiométrico de la reacción. Consultar el Anexo 7.3



C_A^* = Representa la concentración en el equilibrio entre el bióxido de carbono y la amina en presencia de reacción.

2.- Definición de E, el factor de mejora (Enhancement)

$R_A = k_G (p_A^o - p_{Ai}) = E k_L (C_A^* - C_A^o)$ donde R_A es el flux de transferencia de masa molar A a través de la interfase en presencia de reacción química, el significado físico de E es el factor por el cual la rapidez de absorción se incrementa por la reacción, es la relación de la cantidad de gas absorbido A en una unidad de tiempo en un líquido reaccionante, a la cantidad de A que podría ser absorbido si no hubiera reacción.

2.13 Conceptos para diferenciar reacciones lentas y rápidas, los órdenes de reacción y si las reacciones se dan en el seno de la fase líquida o en la película del líquido.

La Figura 8 muestra en las ordenadas al factor de mejora E como función del número de Hatta \sqrt{M} , calculado con la ecuación (25)

$$\frac{R_A}{k_L C_A^*} = E = \frac{\left(M \frac{E_i - E}{E_i - 1} \right)^{\frac{1}{2}}}{\tanh \left(M \frac{E_i - E}{E_i - 1} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (25)$$

y también tiene como parámetro al factor de mejora E_i para una reacción extremadamente rápida dado por la ecuación (31)

$$E_i = 1 + \frac{D_B C_B^o}{z D_A C_A^*} \quad (31)$$

La utilidad de esta gráfica es que se puede calcular al factor de mejora E si se evalúa a E_i y al número de Hatta \sqrt{M} .

La segunda es que dependiendo de las evaluaciones de las restricciones matemáticas indicadas en la figura 8, se puede conocer el orden de la reacción y si se da en la película o en el seno de fase líquida dependiendo de los diversos gradientes de concentraciones en la fase líquida y mostrados en la Figura (9).

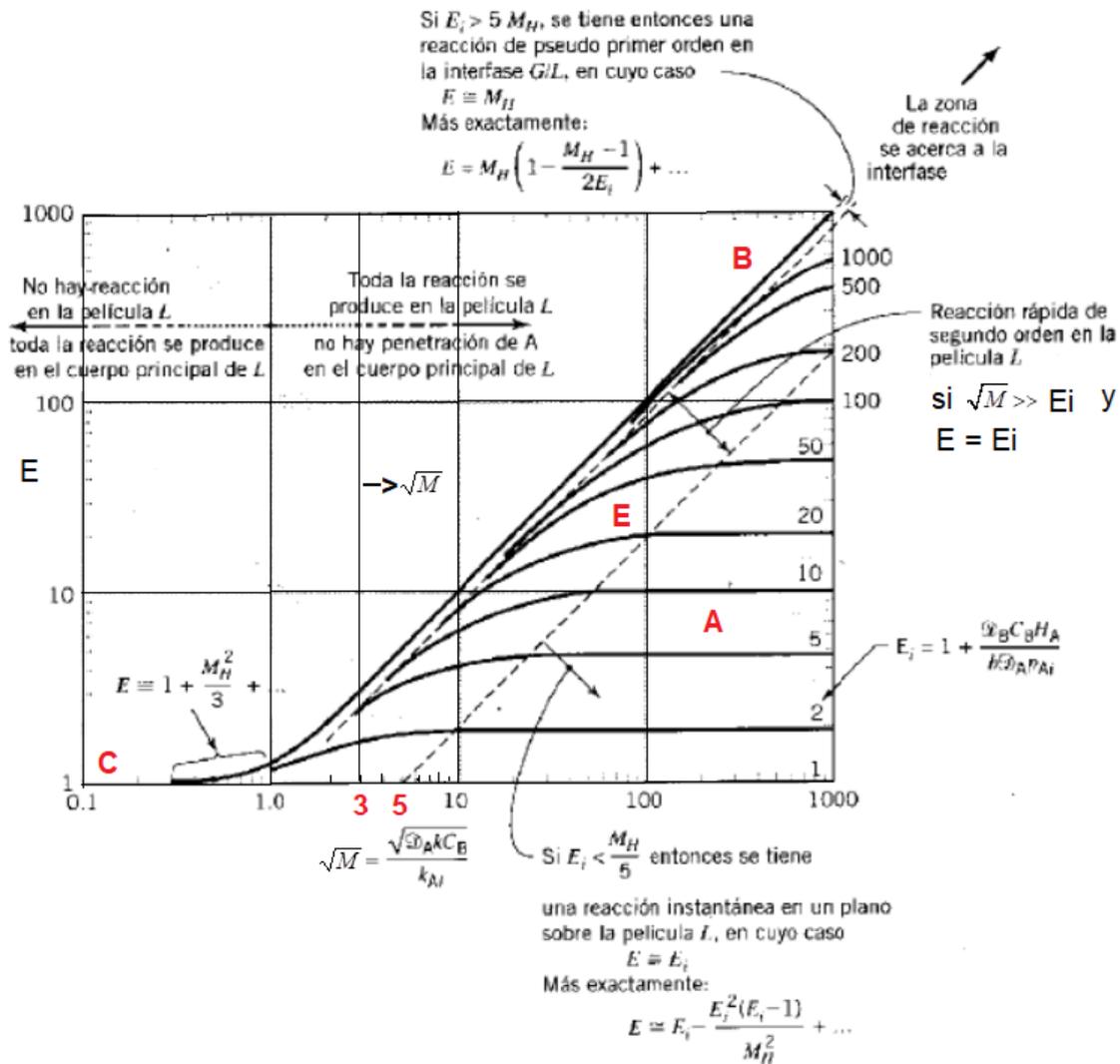


Fig. 8 El factor de mejora E Vs. N° de Hatta \sqrt{M}

Caso 1. (régimen B) reacciones de primer o pseudo primer orden en la película del líquido. Caso 2a (régimen C) reacciones lentas. Caso 2b (régimen D) reacciones extremadamente lentas con un número de Hatta $\sqrt{M} < 0.1$. Caso 3, (régimen E) reacciones rápidas de segundo orden en la película del líquido. Caso 4 (régimen A) reacciones de orden N infinitamente rápidas.

Cuando $\sqrt{M} \gg E_i$ y $E = E_i$ como se muestra en la Figura 8, Danckwerst [2]-[p-44] menciona que la reacción es rápida de segundo orden en la película del líquido, aquí en el tiempo de contacto, la reacción es rápida o la concentración del reactivo (la amina al 15% en masa) es baja y se tienen perfiles como en el Caso 3 de las Figuras 8 y 9.

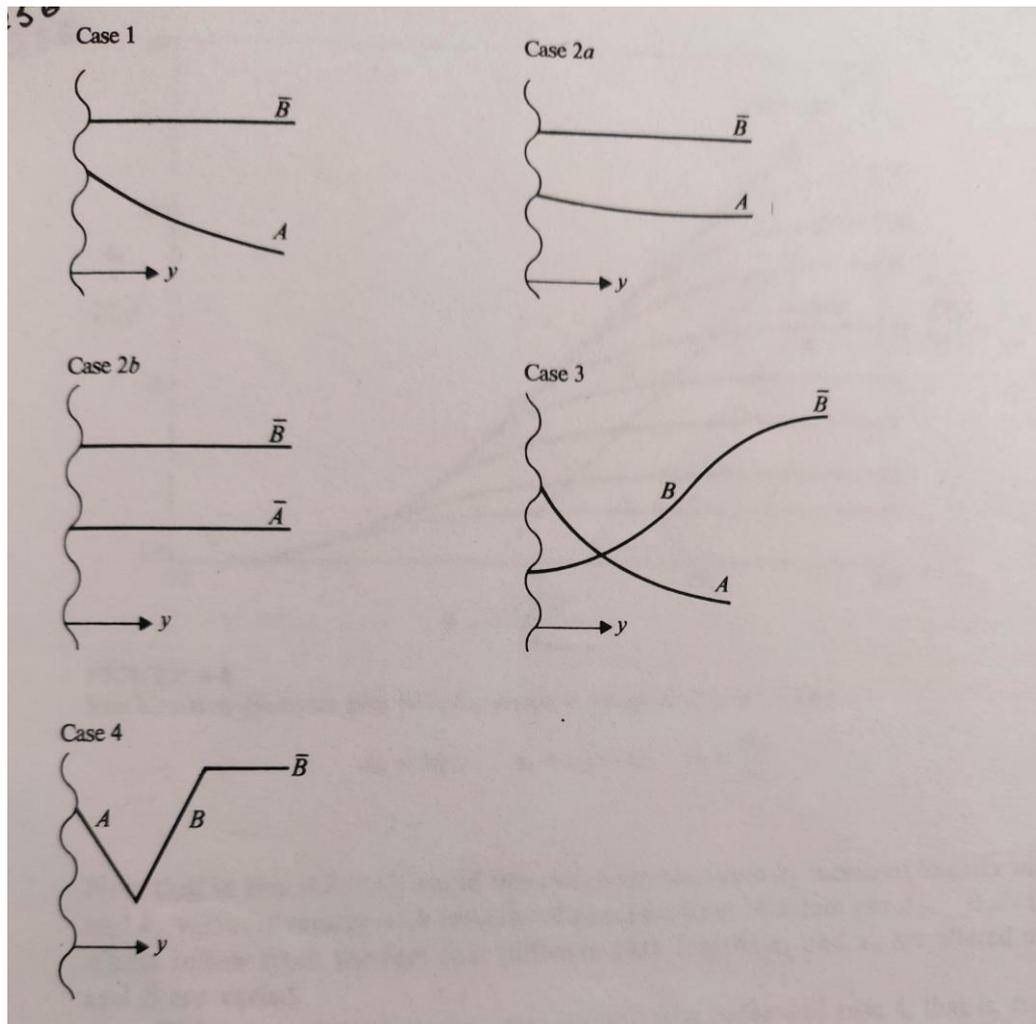


Fig. 9.- Caso 1, (régimen B) reacciones de primer o pseudo primer orden en la película del líquido. Caso 2a (régimen C) reacciones lentas. Caso 2b (régimen D) reacciones extremadamente lentas con un número de Hatta $\sqrt{M} < 0.1$. Caso 3, (régimen E) reacciones rápidas de segundo orden en la película del líquido. Caso 4 (régimen A) reacciones de orden n infinitamente rápidas.

Para decidir si una reacción es lenta o rápida, se parte de la unidad de superficie de la interfase gas-líquido, se supone que la resistencia en la fase gaseosa $1/k_g$ es insignificante pero no en la película del líquido $1/k_L$, donde se presentan dos mecanismos simultáneos, por esto es necesario utilizar el significado del N° de Hatta que es aplicable a la película del lado del líquido, y que se define como se vio anteriormente como un parámetro de conversión en la película.

$$\sqrt{M} = \frac{\sqrt{k_2 C_B^0 D_A}}{k_L} = \frac{\text{máxima conversión posible en la película}}{\text{máximo transporte por difusión a través de la película}}$$

Froment & Bischoff [13] proponen el siguiente criterio para decidir si una reacción se da en la película o en el seno de la fase líquida:

Si se cumple que $\sqrt{M} > 3$ se da en la película, mientras que si toma lugar en el seno de la fase líquida el N° de Hatta $\sqrt{M} < 0.3$. Este criterio también se muestra en la parte intermedia de la Fig. 8.

Para una reacción de cualquier orden se aplica la siguiente expresión para calcular el N° de Hatta.

$$\sqrt{M} = \frac{\sqrt{\frac{2}{m+1} D_A k_{mn} C_A^{*(m-1)} C_B^{o(n)}}}{k_L} \quad (27)$$

$m =$ Orden de reacción con respecto al reactivo A

$n =$ Orden de reacción con respecto al reactivo B

Para la reacción $CO_2 + 2R_1NH_2 \leftrightarrow R_1NHCOO^- + R_1NH_3^+$ se tiene que $m = 1$ y $n = 1$ para la ecuación (27)

La Ec. (25) de Van Krevelen y Hoftijzer no da un valor explícito para E , por lo tanto, Welck *et al* [1] proporcionan la Ec. (25) explícita para el cálculo de E .

$$\frac{1}{(E-1)^{1.35}} = \frac{1}{(E_i-1)^{1.35}} + \frac{1}{(E_1-1)^{1.35}} \quad (28)$$

$$E = \left[\frac{1}{\frac{1}{(E_i-1)^{1.35}} + \frac{1}{(E_1-1)^{1.35}}} \right]^{1.35} + 1 \quad (29)$$

En la cual

$$E_1 = \frac{\sqrt{M}}{\tanh \sqrt{M}} \quad (30)$$

$$y \quad E_i = 1 + \frac{D_B C_B^o}{z D_A C_A^*} \quad (31)$$

2.14.- Balance de materia, el modelo de absorción con reacción química

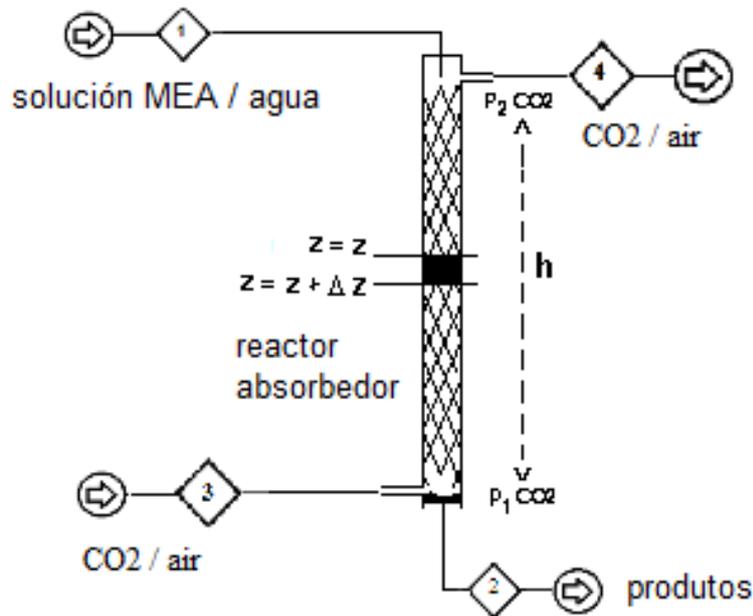


Fig. (10) Reactor absorbedor

Suposiciones:

- (a) La **velocidad longitudinal** del líquido es constante, no hay velocidad radial ni angular.
- (b) El **mezclado radial es perfecto**, no hay gradientes radiales de concentración.
- (c) La **difusión axial es despreciable**, en comparación con los efectos axiales convectivos.
- (d) La **densidad del sistema** es prácticamente constante.
- (e) La concentración volumétrica molar del CO₂ soluble en el seno del líquido en la columna es cero, **todo el CO₂ reacciona en la película** (suposición que deberá comprobarse).
- (f) Los cambios de composiciones de la amina no reaccionada se comportan linealmente a través de la columna.
- (g) Las **presiones parciales a lo largo de la columna** tienen valores muy cercanos a los valores de las presiones de equilibrio en la interfase $\bar{P}_{CO_2} = P^*_{CO_2}$, y **también se comportan linealmente** de acuerdo al planteamiento del siguiente balance de masa en la fase gaseosa ascendente a través de los empaques del reactor-absorbedor:

Balance de masa utilizando la ecuación de continuidad de A para ρ y D_{AB} constantes en coordenadas cilíndricas

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) = D_{AB} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) + R_A$$

Condiciones para la fase gaseosa

- Existe régimen permanente, las velocidades en los ejes coordenados son constantes, así como también la densidad y el coeficiente de difusividad
- No hay reacción en la fase gaseosa que asciende a través de los empaques de la torre, sólo en la fase líquida descendente, por lo tanto:

$$D_{AB} \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} = 0$$

Utilizando la ecuación de los gases ideales

$$c_A = \bar{y}_A C, \quad C = \frac{P_T}{RT}$$

$$c_A = \bar{y}_A \frac{P_T}{RT} = \frac{\bar{p}_A}{RT}$$

Se obtiene

$$D_{AB} \frac{\partial^2 \bar{p}_A}{RT} \frac{1}{\partial z^2} = 0$$

$$\frac{\partial^2 \bar{p}_{CO_2}}{\partial z^2} = 0$$

Condiciones a la frontera

$$\left. \begin{array}{l} \bar{p}_{CO_2} = \bar{p}_{1CO_2} \quad a \quad z = 0 \\ \bar{p}_{CO_2} = \bar{p}_{2CO_2} \quad a \quad z = h \end{array} \right\} \rightarrow \boxed{\bar{p}_{CO_2} = \left(\frac{\bar{p}_{2CO_2} - \bar{p}_{1CO_2}}{h} \right) z + \bar{p}_{1CO_2}}$$

- (h) No hay **fluxes molares radiales ni angulares** en el reactor-absorbedor, sólo longitudinales y temporales.
- (i) **El control de la transferencia de masa reside en la película de la fase líquida** (suposición que deberá comprobarse)

Balance de materia para el CO₂ en la fase líquida

Se puede plantear el siguiente balance diferencial en un volumen de control ($\varepsilon A_T \Delta z$) situado en algún lugar de la Fig. (10).

Entradas = Salidas + Acumulación - Reacción

$$-D_L \varepsilon A_T \frac{\partial C_A^o}{\partial z} \Big|_z + \varepsilon A_T L C_A^o \Big|_z + R_A a \Delta z A_T = -D_L \varepsilon A_T \frac{\partial C_A^o}{\partial z} \Big|_{z+\Delta z} +$$

$$\varepsilon A_T L C_A^o \Big|_{z+\Delta z} + \varepsilon A_T \Delta_z \frac{\partial C_A^o}{\partial t} - r \varepsilon A_T \Delta_z \quad (32)$$

$$D_L \varepsilon A_T \frac{\partial C_A^o}{\partial z} \Big|_{z+\Delta z} - D_L \varepsilon A_T \frac{\partial C_A^o}{\partial z} \Big|_z - \varepsilon A_T L C_A^o \Big|_{z+\Delta z} + \varepsilon A_T L C_A^o \Big|_z =$$

$$- R_A a \Delta z A_T + \varepsilon A_T \Delta_z \frac{\partial C_A^o}{\partial t} - r \varepsilon A_T \Delta_z \quad (33)$$

Dividiendo entre el volumen de control ($\varepsilon A_T \Delta z$) y tomando límites se obtiene la Ec. (34)

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \left\{ \frac{D_L \frac{\partial C_A^o}{\partial z} \Big|_{z+\Delta z} - D_L \frac{\partial C_A^o}{\partial z} \Big|_z}{\Delta z} - \frac{L C_A^o \Big|_{z+\Delta z} - L C_A^o \Big|_z}{\Delta z} \right\} = \frac{\partial C_A^o}{\partial t} - \frac{R_A a}{\varepsilon} - r$$

$$D_L \frac{\partial^2 C_A^o}{\partial z^2} - \frac{L \partial C_A^o}{\partial z} = \frac{\partial C_A^o}{\partial t} - \frac{R_A a}{\varepsilon} - r$$

$$-D_L \frac{\partial^2 C_A^o}{\partial z^2} + \frac{L \partial C_A^o}{\partial z} = -\frac{\partial C_A^o}{\partial t} + \frac{R_A a}{\varepsilon} + r$$

$$L \frac{\partial C_A^o}{\partial z} + \frac{\partial C_A^o}{\partial t} - \frac{R_A a}{\varepsilon} - r = D_L \frac{\partial^2 C_A^o}{\partial z^2} \quad (34)$$

convección *acumulación* Absorción reacción *difusión*
con reacción

Si no hay acumulación en el régimen permanente y, despreciando los términos convectivos y difusivos del CO₂ absorbido, en comparación con la reacción en la película y si además la rapidez de absorción con reacción es apreciablemente mayor que la rapidez de absorción física se obtiene:

$$\boxed{-\frac{R_A a}{\varepsilon} - r = 0} \quad (35)$$

Balance de materia para la amina en la fase líquida

De la Fig. (9) se puede plantear también el siguiente balance diferencial de masa para la monoetanolamina:

Entradas = Salidas + Acumulación – Reacción

No hay acumulación del reactivo líquido B

$$\varepsilon A_T LC_B^o \Big|_Z = \varepsilon A_T LC_B^o \Big|_{Z+\Delta Z} - r \varepsilon A_T \Delta z$$

arreglando términos se obtiene:

$$\varepsilon A_T LC_B^o \Big|_{Z+\Delta Z} - \varepsilon A_T LC_B^o \Big|_Z = r \varepsilon A_T \Delta z \quad (36)$$

Dividiendo entre el volumen de control ($\varepsilon A_T \Delta z$) y tomando límites a la ecuación anterior se obtiene

$$\lim \left\{ \frac{LC_B^o \Big|_{Z+\Delta Z} - LC_B^o \Big|_Z}{\Delta z} \right\} = r$$

$$\Delta z \rightarrow 0$$

$$\boxed{L \frac{dC_B^o}{dz} = r} \quad (37)$$

Sustituyendo (37) en (35) se obtiene

$$-\frac{R_A a}{\varepsilon} = L \frac{dC_B^o}{dz}$$

$$L dC_B^o = -\frac{R_A a}{\varepsilon} dz \quad (38)$$

Integrando la ecuación (38) desde el domo hasta el fondo de la columna se obtiene:

$$h = -\frac{L \varepsilon}{a} \int_{C_B^o \text{ Domo}}^{C_B^o \text{ Fondo}} \frac{dC_B^o}{R_A} = \begin{cases} \boxed{h = \frac{L \varepsilon}{a} \int_{C_B^o \text{ Fondo}}^{C_B^o \text{ Domo}} \frac{dC_B^o}{R_A}} \\ \frac{cm^3}{cm^2} \left(\frac{h \text{ cm}^2}{\text{gmol CO}_2} \frac{\text{gmol MEA}}{cm^3 \text{ Sol}} \right) \\ \frac{cm^3}{cm^3} \end{cases} \quad (39)$$

3.- CUESTIONARIO

1. Encontrar el mayor tiempo de residencia en la columna de la mezcla líquida alimentada de (MEA-H₂O) de uno de los siguientes flujos 5, 8 ó 10 L/h, ya que para este proceso interesa el mayor espacio de tiempo para la formación de la mayor cantidad de productos, los iones carbámico (R_1NHCOO^-) y los iones amina ($R_1NH_3^+$).
2. Calcular el coeficiente volumétrico individual y temporal de transferencia de masa con reacción química $k_L r a = k_L a \times E$, a diferentes alturas de la columna desde la base al domo de la columna
3. ¿Cuál es el mecanismo controlante (el más lento) entre la difusión o la reacción en la fase líquida descendente?
- 4.- Utilizando el modelo de la película ¿Dónde se da la reacción, (en la película del líquido o en el seno de la fase líquida).
- 5.- ¿Cuál es el régimen de reacción?
- 6.- Determinar la conversión del CO₂ en la película del líquido y presentar en una gráfica la conversión en función de las posiciones z de la columna, presentar el análisis de este perfil

5.- NOMENCLATURA

a = Área interfacial efectiva por unidad de volumen empacado: cm²/cm³

a_t = Área de la superficie total del empaque por unidad de volumen de columna empacada: cm²/cm³

ATF = Área transversal de flujo entre empaques: cm²

C_A^o = Concentración de CO₂ en el seno de la fase líquida: gmol CO₂ /L solución

C_A^{*} = Concentración de CO₂ en la interfase gas-líquido: gmol CO₂ /L solución

C_B^o = Concentración de la amina en el seno del fluido de la fase líquida:
gmol amina /L solución

D_A, D_B = Coeficientes de difusión mutua: cm²/s

E = Factor de mejora

E_i = Factor de mejora para una reacción infinitamente rápida

E₁ = Factor dado por la ecuación del factor de mejora E

G = Masa velocidad de la corriente gaseosa: g / s cm²

H = Altura de la columna de absorción: cm

$m = \text{Relación de equilibrio } atm / (gmol CO_2 / cm^3 \text{ solución})$

$j_A = \text{Flux difusivo: } gmol A / s cm^2$

$k_1 = \text{Constante de velocidad de reacción de primer o pseudo primer orden: } 1/s$

$k_G a = \text{Coeficiente volumétrico individual y temporal del lado de la fase gaseosa: } gmolCO_2 / s cm^3 atm$

$k_2 = \text{Constante de velocidad de reacción de segundo orden: } L / gmol s$

$k_{LA} = \text{Coeficiente volumétrico individual y temporal del lado de la fase líquida: } 1/s$

$L = \text{Masa velocidad de la corriente líquida: } g/s cm^2$

$\sqrt{M} = \text{Número de Hatta}$

$p = \text{Presión atmosférica: } atm$

$r = \text{Rapidez de reacción: } \frac{(cm^3 / gmol)^{-1+n}}{s}$

$R_A = \text{Rapidez de absorción con reacción química a través de la interfase: } gmol A / s cm^2$

$S = \text{Superficie interfacial en el modelo de la película: } cm^2$

$t = \text{tiempo: } s$

$x = \text{Abscisa en el modelo de la película, posición arbitraria en la columna de absorción: } cm$

$z = \text{Factor estequiométrico de reacción entre el bióxido de carbono y la monoetanolamina con un valor de 2}$

$Z = \text{Eje coordenado para la altura en la columna de absorción: } cm$

$\varepsilon = \text{fracción de huecos entre los empaques de la columna de absorción}$

$\delta = \text{Espesor de la película de difusión: } cm$

$\sigma_L = \text{Tensión superficial del líquido: } dynas / cm$

$\sigma_c = \text{Tensión superficial crítica: } dynas / cm$

$\rho_G = \text{Densidad de la fase gaseosa: } gr/cm^3$

$\rho_L = \text{Densidad de la fase líquida: } gr/cm^3$

6.- BIBLIOGRAFÍA

- 1.- Wolf-Dieter Deckwer, Bubble Column Reactors, John Wiley and Sons, 1992.
- 2.- P.V. Danckwerst, *Gas-Liquid Reactions*, McGraw-Hill, New York, 1970.
- 3.- R.M. Wellek, R.J. Brunson and F.H. Law, Can. J. Chem Engng. 56 (1978),181. Determination of the enhancement factor for mass transfer with a instantaneously fast chemical reaction.
- 4.- Aquil Jamal, Axel Meisen, C. Jim Lim. Kinetics of carbon dioxide absorption and desorption in aqueous alkanolamine solutions using a novel hemispherical contactor – I. Experimental apparatus and mathematical modeling. Chemical Engineering Science 61 (2006) 6571-6589.
- 5.- Aquil Jamal, Axel Meisen, C. Jim Lim. Kinetics of carbon dioxide absorption and desorption in aqueous alkanolamine solutions using a novel hemispherical contactor – II. Experimental apparatus and mathematical modeling. Chemical Engineering Science 61 (2006) 6590-6603.
- 6.- H. Hikita and Asai, Int. Chem. Eng. 4 (1964), 5. Gas absorption with a two-step chemical reaction
- 7.- Octave Levenspiel, Ingeniería de las Reacciones Químicas 3/e, Editorial limusa Wiley 2004, Ciudad de México

- 8.- P.V. Danckwerst, G.C., M.B.E., M.A., S.M., C. Eng. and M.M. Sharma, B. Chem. Eng., M.Sc. (Tech.), Ph.D., A.R.I.C., The absorption dioxide into solutions of alkalis and amines. (with some notes on hydrogen sulphide and carbonil sulphide). Review Series No. 2., The Chemical Engineer, October, 1966. Supplied by The British Library – The world's knowledge.
- 9.- James R. Welty, Charles E. Wicks, Robert E. Wilson, 2/e. Fundamentos de transferencia de momentum, calor y masa, Limusa Wiley. Ciudad de México 2000.
- 10.- Norman, W.S. Distillation, Absortion, and Cooling Towers, 1961 (London: Longmans Green & Co. Ltd.).
- 11.- Donald L. Katz. David Cornell. John A, Vary. Riki Kobayashi. Jack R. Elenbaas. Fred H. Poetttmann. Charles F. Weinaug. Handbook of Natural Gas Engineering. McGraw-Hill Book Company New York.
- 12.- Mariano Pérez Camacho. Antonio Valiente Barderas. Ricardo Pérez Camacho. Mass Transfer Coefficients in an Absorber Reactor in the Unit Operations Laboratory. EPRA Internatinal Journal of Multidisciplinary Research (IJMR). Volume: 4 | Issue: 2 | February 2018 SJIF Impact Factor: 4.924 ISSN (Online): 2455-3662
- 13.- Froment F. Gilbert & Kenneth B. Bischoff. Chemical Reactor Analysis & Design. John Wiley & Sons. New York. 1979.
- 14.- Mariano Pérez Camacho. Antonio Valiente Barderas. Ricardo Pérez Camacho. MASS TRANSFER COEFFICIENTS IN AN ABSORBER RECTOR IN THE UNIT OPERATIONS LABORATORY, THE TEMPERATURE PROFILE (2). EPRA International Journal of Published By EPRA Publishing CC License Multidisciplinary Research. SJIF Impact Factor :7.032. ISI I.F. Value : 1.188. DOI : 10.36713/epra2013. Indexed By: ISSN (Online) : 2455 – 3662. Monthly Peer Reviewed & Indexed. International Online Journal. Volume: 6 Issue: 5 May 2020
- 15.- Antonio Valiente Barderas. Ricardo Pérez Camacho. MASS TRANSFER COEFFICIENTS IN AN ABSORBER REACTOR IN THE UNIT OPERATIONS LABORATORY (1). EPRA International Journal of Published By : EPRA Journals CC License Multidisciplinary Research ISSN (Online) : 2455 – 3662 SJIF Impact Factor :4.924 Monthly Peer Reviewed & Indexed International Online Journal Volume: 4 Issue: 2 February 2018
- 16.- Ricardo Lobo Oehmichen. Principios de transferencia de masa. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa. 1997
- 17.- Kinetics of gas-liquid reactions Part I. General. Theory by D.W. Van Krevelen and P. J. Hoftijzer (Central Institute for Technical Research of the Netherlands State Mines, Chemical Laboratory, Geleen, The Netherlands). 67 (1948) RECUEIL 563 541. 124.01 1.6
- 18.- Aída Gutiérrez Alejandre, María Luisa Galicia Pineda, Absorción de CO₂ en una columna empacada, práctica del Laboratorio de Ingeniería Química III, Facultad de Química, 2016, UNAM, Ciudad de México.

7.- APENDICE

7.1- Datos del equilibrio termodinámico

Los datos para el equilibrio termodinámico para el sistema (MEA/agua) - (CO₂ / AIRE) en presencia de reacción química los reporta Donal L.Katz [11].

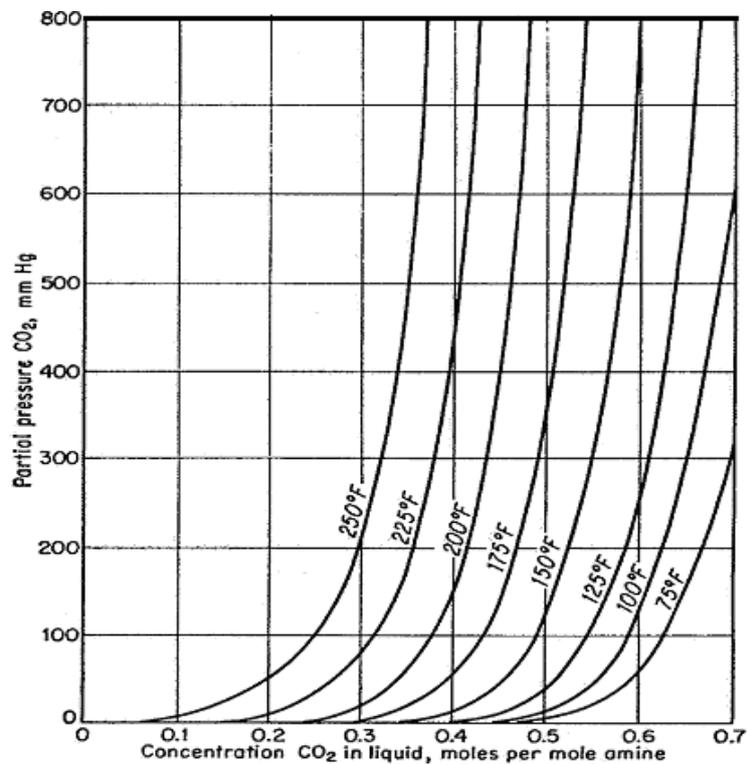
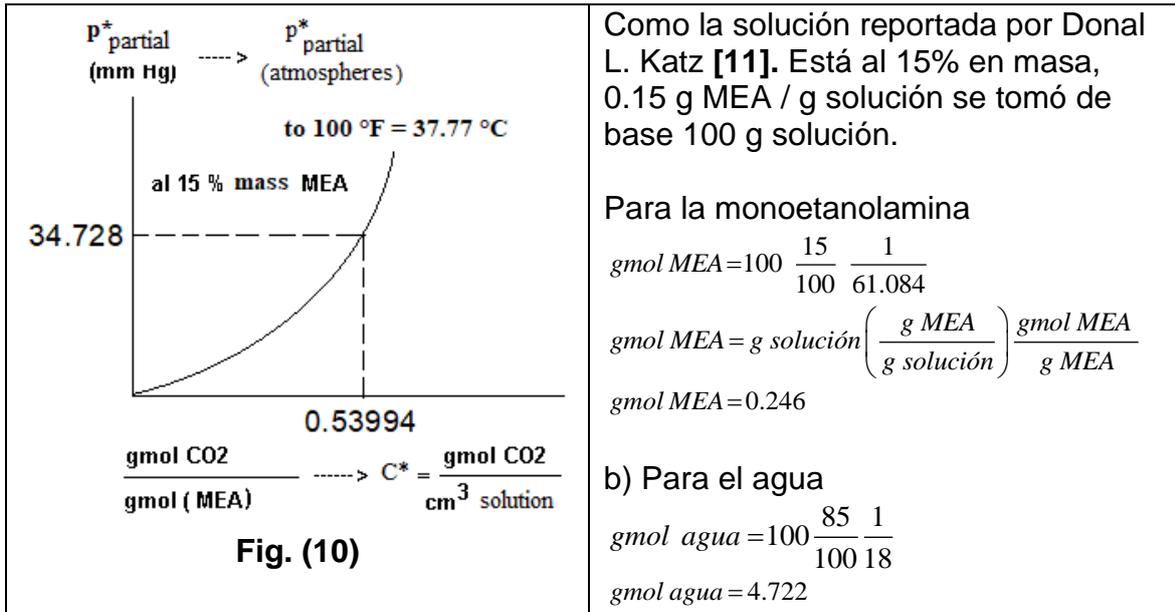


Fig. 16-36. Equilibrium pressure of CO₂ from 15 wt % monoethanolamine solution. (Kohl, 16-45; Mason and Dodge, 16-52. Courtesy AIChE.)

Fig. (11) Sistema (MEA/H₂O – CO₂/aire) en presencia de reacción química

T = 37.77 °C = 100 °F		Continuación		Continuación	
$X^* = \frac{gmol\ CO_2}{gmol\ MEA}$	$p^* = mm\ Hg$				
0	0	0.53994	34.728	0.64304	276.72
0.05	0	0.56128	56.058	0.64934	294.67
0.10	0	0.57409	70.811	0.65562	317.51
0.15	0	0.58262	85.535	0.66383	379.47
0.20	0	0.58902	103.50	0.66587	397.4
0.25	0	0.59756	126.37	0.67212	425.12
0.30	0	0.60183	142.7	0.67408	457.72
0.35	0	0.61037	162.31	0.68032	488.71
0.4	0	0.61677	180.27	0.68447	509.91
0.43908	0	0.62424	200.05	0.6865	531.1
0.46951	3.2785	0.62843	214.74	0.690	555.56
0.49885	9.9449	0.63261	231.05	0.69687	576.54
		0.63676	253.88		

Se ha seleccionado la curva a 100°F (37.77°C) de la Fig. (9) para obtener la relación de equilibrio **m** debido a que la reacción es exotérmica y es la que más se ajusta a los datos experimentales. Para esto se requiere cambiar las unidades de los ejes coordenados de acuerdo con el diagrama de la Fig. (11)



Datos

Fórmula de la monoetanolamina **H₂NCH₂CH₂OH**

PM mea = 61.084

PM water = 18

% *W mea* = 15

T°C mea = 24°C

De la gráfica de la Fig. (12) Se puede obtener la densidad de la solución

$$\rho\ solución = 1.005 \frac{g\ solución}{cm^3\ solución}$$

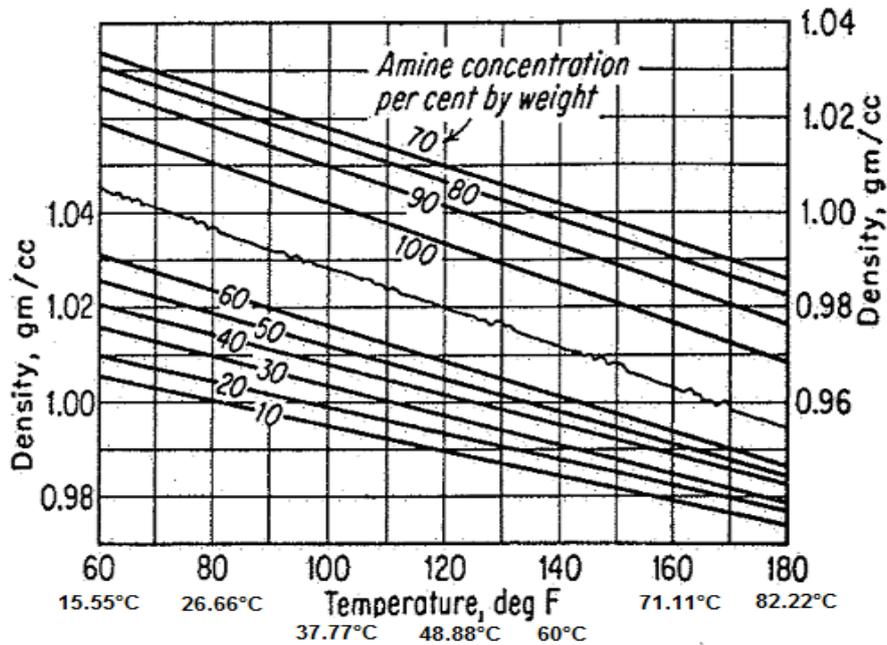


Fig. 16-40. Density of aqueous monoethanolamine solutions. (16-38, Courtesy Dow Chemical Co.)

Fig. (12) Densidades de la solución MEA/H₂O

Operaciones:

$$x \text{ Molar MEA} = 0.0494 \frac{\text{gmol MEA}}{\text{gmol solución}}$$

$$PM \text{ solución} = x \text{ Molar MEA} \times PM \text{ MEA} + (1 - x \text{ Molar MEA}) \times PM \text{ agua}$$

$$PM \text{ solución} = 20.13 \frac{\text{g solución}}{\text{gmol solución}}$$

$$\rho \text{ Molar Solución} = \rho \text{ solución} \times \frac{1}{PM \text{ solución}}$$

$$\rho \text{ Molar Solución} = 0.05 \frac{\text{gmol solución}}{\text{cm}^3 \text{ solución}} = \frac{\text{gmol agua}}{\text{cm}^3 \text{ agua}}$$

Cambios en las abscisas

$$0.53994 \frac{\text{gmol CO}_2}{\text{gmol MEA}} \frac{0.246 \text{ gmol MEA}}{4.722 \text{ gmol H}_2\text{O}} \frac{0.5 \text{ gmol solución}}{\text{cm}^3 \text{ solución}} = 0.0014 \frac{\text{gmol CO}_2}{\text{cm}^3 \text{ solución}}$$

Cambios en las ordenadas

$$p^* \text{ atm} = p^* \text{ mm Hg} \frac{1 \text{ atm}}{760 \text{ mm Hg}}$$

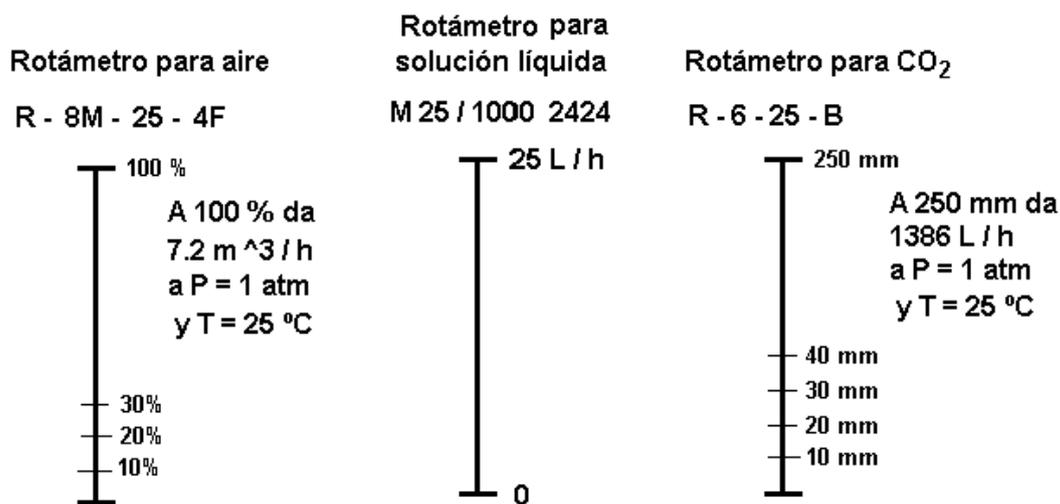
En la tabla siguiente se muestran los cambios de unidades para las ordenadas y las abscisas

T = 37.77 °C = 100 °F		T = 37.77 °C = 100 °F	
$X^* = \frac{gmol\ CO_2}{gmol\ MEA}$	$p^* = mm\ Hg$	$c^* = \frac{gmol\ CO_2}{cm^3\ solución}$	$p^* = atm$
0	0	0	0
0.05	0	0.00013	0
0.10	0	0.00026	0
0.15	0	0.00039	0
0.20	0	0.00052	0
0.25	0	0.00065	0
0.30	0	0.00078	0
0.35	0	0.00091	0
0.4	0	0.00104	0
0.43908	0	0.00114	0
0.46951	3.2785	0.00122	0.00431
0.49885	9.9449	0.0013	0.01309
0.51433	18.255	0.00134	0.02402
0.525	24.847	0.00137	0.03269
0.53994	34.728	0.0014	0.04569
0.56128	56.058	0.00146	0.07376
0.57409	70.811	0.00149	0.09317
0.58262	85.535	0.00152	0.11255
0.58902	103.50	0.00153	0.13618
0.59756	126.37	0.00155	0.16628
0.60183	142.7	0.00157	0.18776
0.61037	162.31	0.00159	0.21357
0.61677	180.27	0.0016	0.2372
0.62424	200.05	0.00162	0.26322
0.62843	214.74	0.00163	0.28255
0.63261	231.05	0.00165	0.30401
0.63676	253.88	0.00166	0.33405
0.64304	276.72	0.00167	0.36411
0.64934	294.67	0.00169	0.38772
0.65562	317.51	0.00171	0.41778
0.66383	379.47	0.00173	0.4993
0.66587	397.4	0.00173	0.52289
0.67212	425.12	0.00175	0.55937
0.67408	457.72	0.00175	0.60226
0.68032	488.71	0.00177	0.64304
0.68447	509.91	0.00178	0.67093
0.6865	531.1	0.00179	0.69882
0.690	555.56	0.00179	0.731
0.69687	576.54	0.00181	0.75861

7.2 Datos para las lecturas de los rotámetros

Para transformar los valores leídos en los rotámetros para Aire (en %) y CO₂, (en mm) utilizar los valores a condiciones estándar especificados abajo de este texto y plantear reglas de tres para conocer cualquier flujo de aire o de bióxido de carbono, después pasar los valores de condiciones estándar a condiciones del Laboratorio de Ingeniería Química.

No es necesario hacer cálculos para conocer el flujo de la alimentación líquida, ya que la escala está en L / h, sólo es necesario cuidar que la parte superior del flotador del rotámetro marque el flujo deseado.



Densidad de la mezcla MEA - AGUA al 15 % en peso
= $0.0007 T^{\circ}\text{C}^2 - 0.5498 T^{\circ}\text{C} + 1016.3$ (kg / m³)

Densidad del aire = $-0.0035 T^{\circ}\text{C} + 1.2791$ (kg / m³)

Densidad del CO₂ = $-0.0053 T^{\circ}\text{C} + 1.9547$ (kg / m³)

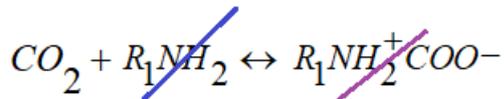
Figura 13. Escalas de los rotámetros instalados en la columna de absorción

NOTA. - Introducir en las ecuaciones anteriores las temperaturas de los gases y de la mezcla líquida para conocer su densidad.

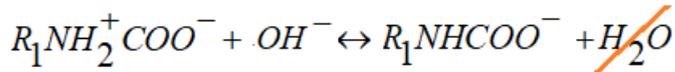
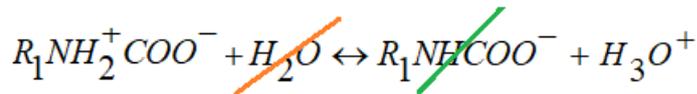
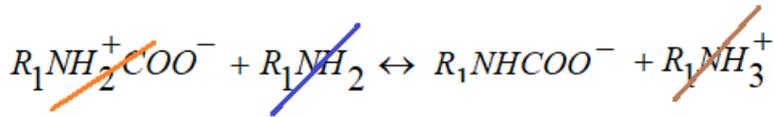
7.3 El sistema reaccionante MEA-H₂O / CO₂-AIR

En los artículos de Jamal [4], [5] se encuentra publicado el siguiente mecanismo para el sistema reaccionante MEA-H₂O / CO₂-AIR, que al sumar los términos se obtiene la reacción publicada en el libro de Danckwerst [2], Hikita [6].

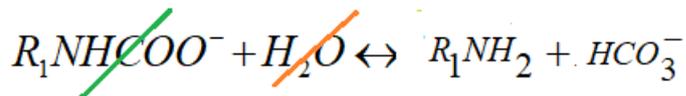
Formación del MEA-zwitterion:



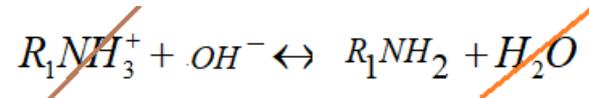
Deprotonación del MEA-zwitterion:



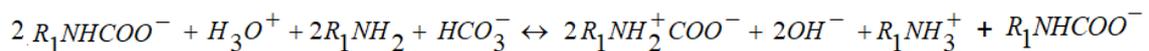
Reversibilidad del MEA-carbamato:



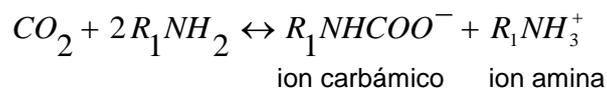
Deprotonación del MEA:



Formación del ion carbámico y el ion amina



Simplificando



La reacción anterior es de segundo orden: $m = 1$, $n = 1$, con una constante de rapidez de reacción hacia la derecha, dada por la siguiente ecuación

$$k_2 := 10^{\left(10.99 - \frac{2152}{T^{\circ}K}\right)} \quad L / (\text{gmol s})$$

7.4 Área interfacial efectiva por unidad de volumen empacado $a = \text{cm}^2/\text{cm}^3$

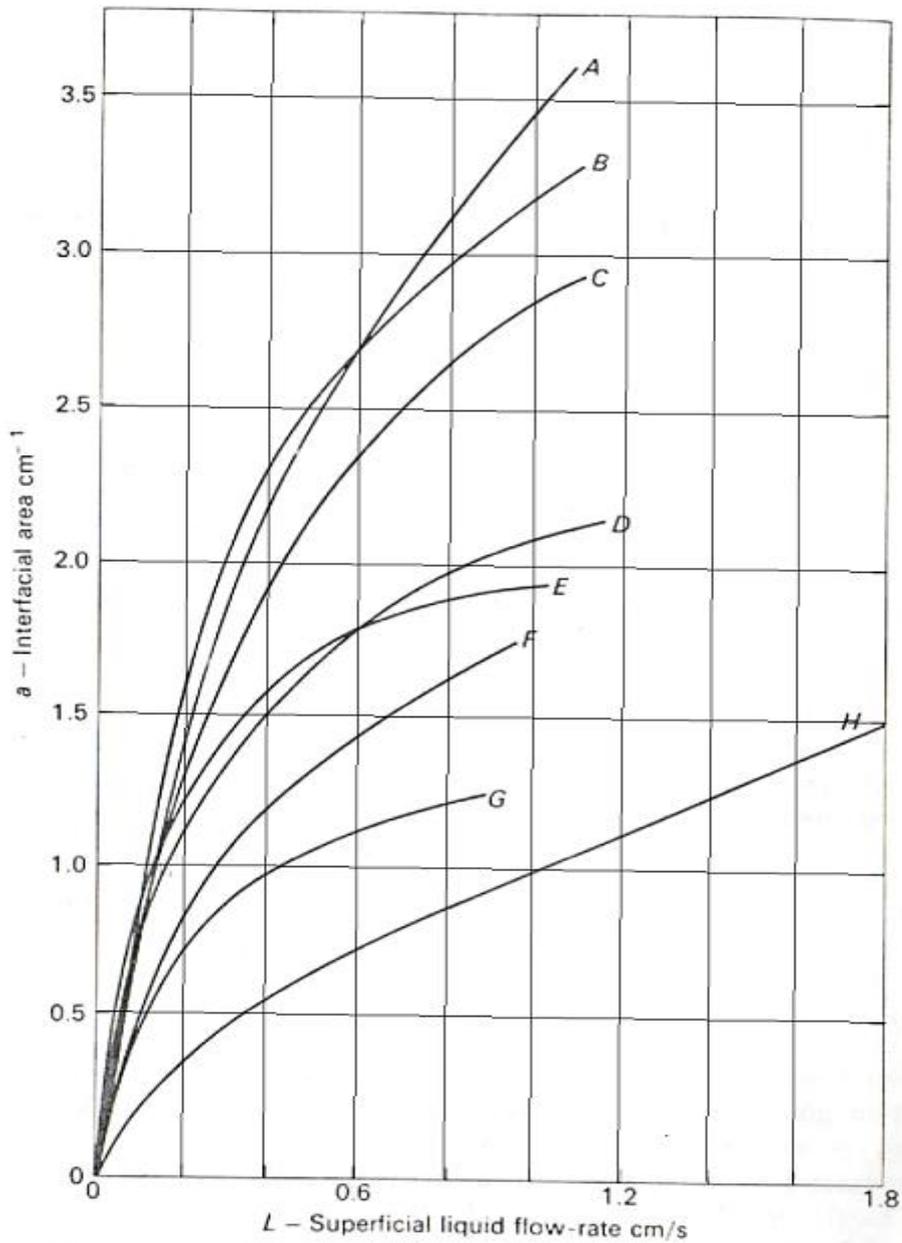


Fig. 9-1 Effective interfacial area for packings (after Danekwerts and Sharma, 1966)

Curve	Type and size of packing	Temperature (°C)	Tower diameter (in.)	Packing density (pieces/cm ³)	Dry packing area (cm ² /cm ³)
A	1/2 in. ceramic Intalox saddles	25	4	0.630	4.7
B	1/2 in. ceramic Pall rings	25	4	0.360	4.2
C	5/8 in. steel Pall rings	25	6	0.220	3.5
D	1/2 in. ceramic Raschig rings	25	4	0.370	3.8
E	1 in. ceramic Pall rings	25	9	0.049	2.2
F	1 in. ceramic Intalox saddles	25	9	0.084	2.5
G	1 in. ceramic Raschig rings	25	9	0.048	1.8
H	1 1/2 in. ceramic Raschig rings	20	18	0.014	1.3

Figura 14. - Área interraccional efectiva por unidad de volumen empacado

Ejemplo

Flujo de alimentación de la solución de MEA – AGUA al reactor-absorbedor

$$L_e := 10 \frac{\text{L}}{\text{h}}$$

La velocidad de la mezcla líquida en la columna para evaluar a , el área específica por unidad de volumen de torre empacada con la curva D

$$L_v := L \cdot \frac{1}{3600} \cdot \frac{1000}{1}$$

$$\frac{\text{cm}}{\text{s}} = \frac{\text{L Sol}}{\text{h} \cdot \text{cm}^2} \cdot \frac{1 \cdot \text{h}}{3600 \text{s}} \cdot \frac{1000 \text{cm}^3}{1 \text{L}}$$

$$L_v = 0.196 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$$

De la **curva D** se puede leer a . Tomar $L = L_v$ la rapidez superficial del flujo del líquido entre los empaques

$$a := 1.15 \frac{\text{cm}^2}{\text{cm}^3}$$

área específica por unidad de volumen de torre empacada

7.5 Los coeficientes de difusión de la amina y del bióxido de azufre

Ejemplo: Alimentación de la mezcla a la columna a 20°C:

1.- Cálculo para la difusividad de la amina en la solución (H₂O, MEA, CO₂ líquido)

Ecuación utilizada:

$$D_A = D_{\text{amina-agua}} = 7.0 \times 10^{-6} \times \frac{1.3 \times 10^{-5}}{2.0 \times 10^{-5}} = 0.455 \times 10^{-5} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$$

Se calcula a la temperatura de entrada a la torre con la Figura 16

Valor constante

El denominador es constante

- La difusividad de la monoetanolamina a 2.5 molar (15% masa) a temperatura estándar de 25°C se determina de la Fig. 15
 $D_{\text{amina-agua}} = 7.0 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ (a 25°C)
- La difusividad del dióxido de carbono en agua a la temperatura de entrada a la torre de 20°C es:
 $D_{\text{CO}_2\text{-agua}} = 1.3 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$, Fig.16
- La difusividad del dióxido de carbono en agua es $2.0 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ a 25°C leída de la Fg.16:
 $D_{\text{CO}_2\text{-agua}} = 2.0 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ (a 25°C)

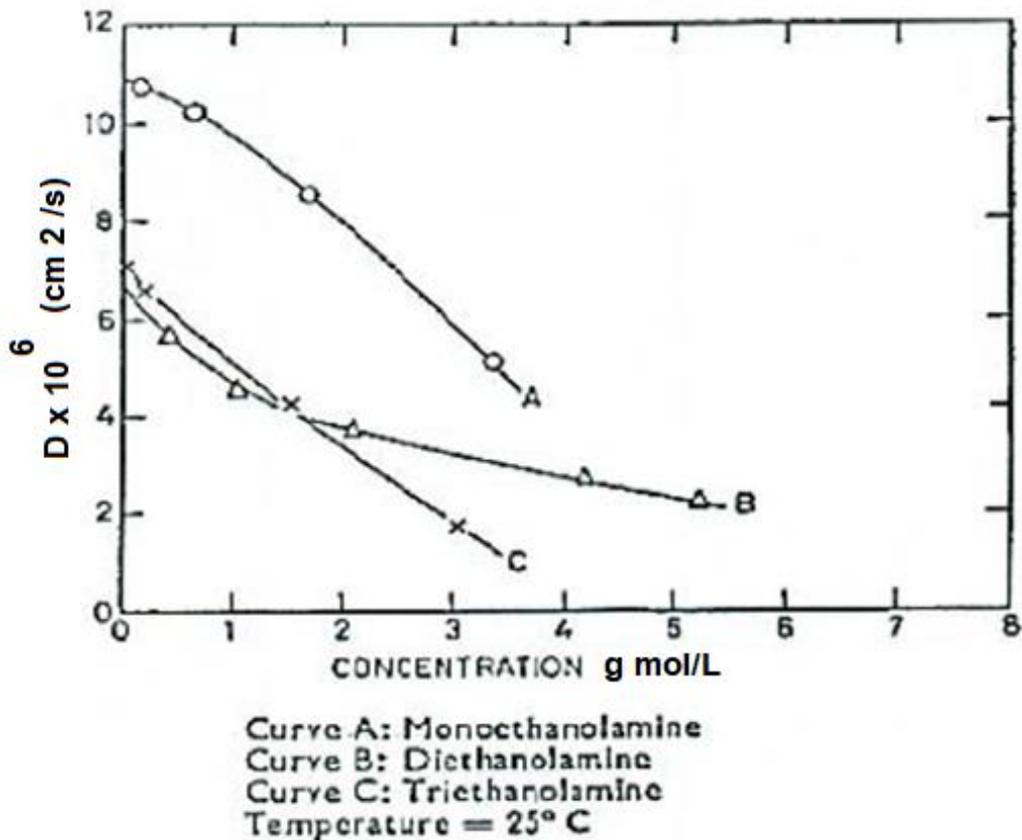


Fig. 15.- Diffusivities of aminas in Water. (Thomas and Furzer). The Chemical Engineer, october, 1966. P. V. Danckwerst.
 M.M. Sharma

2.- Cálculo para la difusividad del dióxido de carbono en la solución (H₂O, MEA, CO₂ líquido)

Ecuación utilizada

$$D_B = D_{CO_2-agua} = \frac{D_{amina-agua}^{25^\circ C}}{D_{amina-agua}^{\circ 25^\circ C}} \times D_{CO_2-agua}$$

Este factor permanece constante

Se calcula a la temperatura de entrada a la torre con ls Figura 16

Factor de corrección

Factor de corrección

$$\frac{D_{amina-agua}^{25^\circ C}}{D_{amina-agua}^{\circ 25^\circ C}} = \frac{7.0 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s} \text{ (a } 25^\circ\text{C Fig.15)}}{11.0 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s} \text{ (a } 25^\circ\text{C Fig.15)}}$$

Coefficiente de difusión a dilución infinita
o coeficiente de difusividad mutua

$$D_B = D_{CO_2-agua} = \frac{7.0 \times 10^{-6}}{11 \times 10^{-6}} \times 1.3 \times 10^{-5} = 8.273 \times 10^{-6} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$$

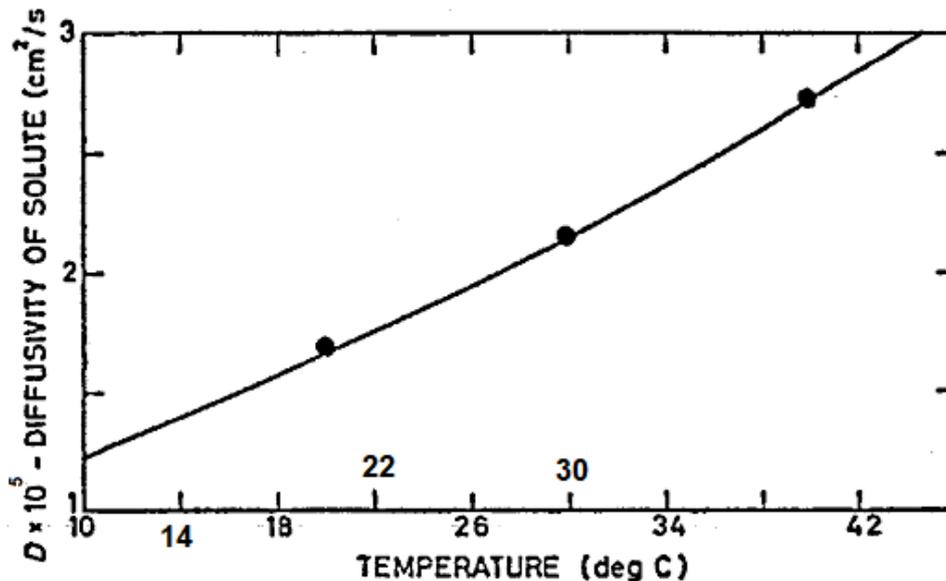
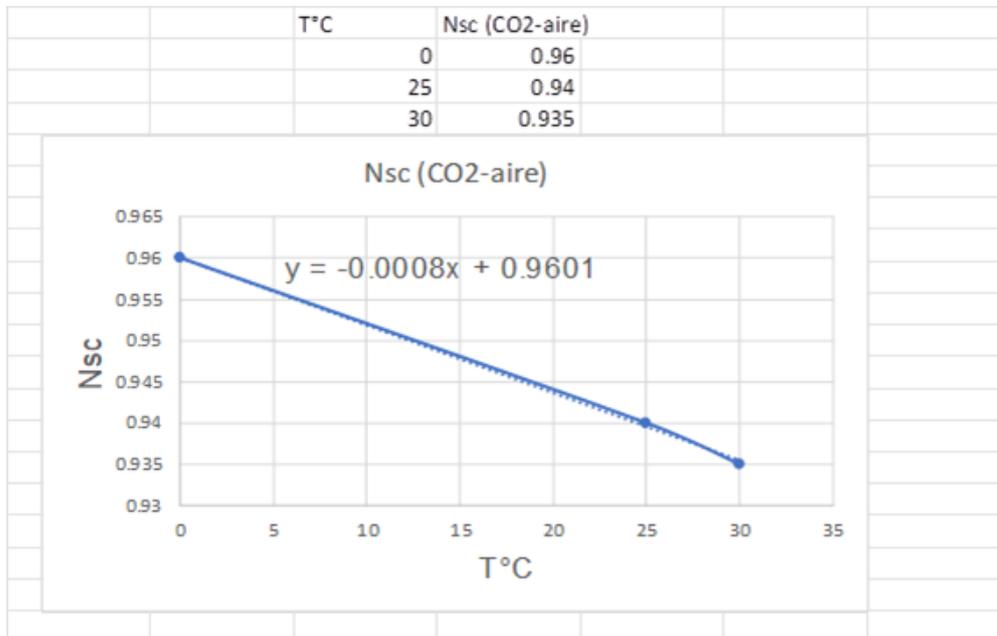


Fig. 16.—The diffusivity of carbon dioxide in water at various temperatures. (Thomas and Adams⁶⁹)

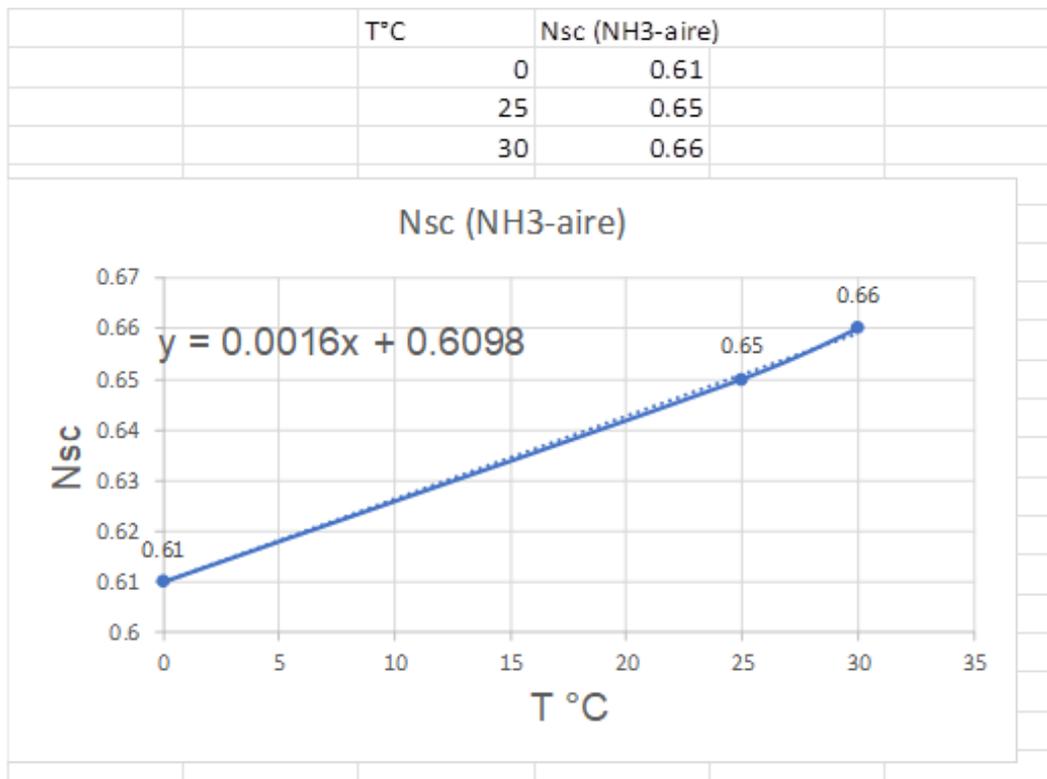
The Chemical Engineer, October, 1966. P. V. Danckwerst.
M.M. Sharma.

7.6 Los números de Schmidt

Para CO₂-Aire



Para NH₃-Aire



Ejemplo

Los Números de Schmidt

Temperatura del aire de entrada en la mezcla, en la base de la torre

$$T^{\circ}\text{CaireE} := 18.4 \quad ^{\circ}\text{C}$$

Temperatura del CO2 de entrada en la mezcla, en la base de la torre

$$T^{\circ}\text{CO2E} := 20 \quad ^{\circ}\text{C}$$

$$T^{\circ}\text{C}_{\text{prom}} := \frac{T^{\circ}\text{CaireE} + T^{\circ}\text{CO2E}}{2} = 19.2 \quad ^{\circ}\text{C}$$

Nsc1 = No. de Schmidt NH3-Aire

Nsc2 = No de Schmidt CO2-aire

$$N_{\text{sc1}} := 0.0016 \cdot T^{\circ}\text{C}_{\text{prom}} + 0.6098$$

$$N_{\text{sc2}} := -0.0008 \cdot T^{\circ}\text{C}_{\text{prom}} + 0.961$$

Para corregir la correlación de $k_g a$

Para corregir la correlación de $k_g a$

$$N_{\text{sc1}} := 0.6485$$

$$N_{\text{sc2}} := 0.942$$

7.7 Ecuaciones para calcular las propiedades del aire y del bióxido de carbono

Densidad del Aire de entrada E

$$\rho_{\text{AIREE}} := \left(-3.142 \cdot 10^{-3} T^{\circ}\text{CaireE} + 1.262 \right) \cdot \frac{1000}{1} \cdot \left(\frac{1}{100} \right)^3$$

$$\frac{\text{g} \cdot \text{aire}}{\text{cm}^3 \cdot \text{aire}} = \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot \left[\frac{1000 \text{g}}{1 \text{kg}} \cdot \left(\frac{1 \text{m}}{100 \text{cm}} \right)^3 \right]$$