

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA



TESIS

**“SÍNTESIS DE ÁCIDO PERACÉTICO A PARTIR DE PERÓXIDO DE
HIDRÓGENO Y ÁCIDO ETANOICO CATALIZADO CON ÁCIDO
SULFÚRICO EN UN REACTOR BATCH”**

PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE

INGENIERO QUÍMICO

Luis Octavio Espinoza Vargas 

Luis Octavio Espinoza Miranda 

CALLAO – PERU

2018

Document Information

Analyzed document	TESIS - LUIS ESPINOZA MIRANDA - VARGAS.pdf (D181146770)
Submitted	2023-12-07 17:47:00 UTC+01:00
Submitted by	
Submitter email	fiq.investigacion@unac.edu.pe
Similarity	4%
Analysis address	fiq.investigacion.unac@analysis.arkund.com

Sources included in the report

SA	Universidad Nacional del Callao / 02 TESIS -DURAN HUAMANI CARLOS ALBERTO-TAMARA LUNA CHRISTIAN KENYI.pdf Document 02 TESIS -DURAN HUAMANI CARLOS ALBERTO-TAMARA LUNA CHRISTIAN KENYI.pdf (D110165454) Submitted by: fiq.investigacion@unac.edu.pe Receiver: fiq.investigacion.unac@analysis.arkund.com	 5
SA	Universidad Nacional del Callao / 03 TESIS -ESPINOZA CUEVA - MOLOCHE LARREA.pdf Document 03 TESIS -ESPINOZA CUEVA - MOLOCHE LARREA.pdf (D111390416) Submitted by: fiq.investigacion@unac.edu.pe Receiver: fiq.investigacion.unac@analysis.arkund.com	 4
SA	P02G12.docx Document P02G12.docx (D153405485)	 1
SA	RDTA Adiabatico (1).pdf Document RDTA Adiabatico (1).pdf (D101497968)	 1
SA	RDTA ADIABÁTICO_Alberto Pérez Calvo_y_A Adrián Arcís Carayol.pdf Document RDTA ADIABÁTICO_Alberto Pérez Calvo_y_A Adrián Arcís Carayol.pdf (D103803494)	 1

Entire Document

0

100%

MATCHING BLOCK 1/12

SA

02 TESIS -DURAN HUAMANI CARLOS ALBERTO-TAMARA ... (D110165454)

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA "

SÍNTESIS DE ÁCIDO PERACÉTICO A PARTIR DE PERÓXIDO DE HIDRÓGENO Y ÁCIDO ETANOICO CATALIZADO CON ÁCIDO SULFÚRICO EN UN REACTOR BATCH" PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE INGENIERO QUÍMICO Luis Octavio Espinoza Vargas Luis Octavio Espinoza Miranda CALLAO – PERU 2018

1 ÍNDICE I. INTRODUCCION 8 1.1 Problema de Investigación
..... 10 1.2



PRÓLOGO DEL JURADO

La presente Tesis fue sustentada por los Bachilleres **ESPINOZA VARGAS LUIS OCTAVIO** y Bachiller **ESPINOZA MIRANDA LUIS OCTAVIO** ante el Jurado de Sustentación de Tesis conformado por los siguientes docentes ordinarios de la Universidad Nacional del Callao:

ING° CALDERÓN CRUZ JULIO CÉSAR	Presidente
ING° GUTIERREZ CUBA CÉSAR	Secretario
ING° AVELINO CARHUARICRA CARMEN GILDA	Vocal
ING° MEDINA COLLANA JUAN TAUMATURGO	Asesor

Tal como está asentado en el Libro de actas N° 02 Folio N° 120 y Acta N° 303 de fecha 18 de diciembre de 2018, para optar el Título Profesional de Ingeniero Químico en la Modalidad de Tesis sin Ciclo de Tesis, de conformidad a lo dispuesto en el Reglamento de Grados y Títulos de la Universidad Nacional del Callao, aprobado por Resolución de Consejo Universitario N° 150–2023–CU del 15 de junio de 2023

ÍNDICE

I.	INTRODUCCION	8
1.1	Problema de Investigación	10
1.2	Formulación del problema.....	11
1.2.1	Problema General.....	11
1.2.2	Problemas específicos	11
1.3	Objetivos de la investigación.....	11
1.3.1	Objetivo general.....	11
1.3.2	Objetivos específicos	11
1.4	Justificación Las razones y motivos por las que se justifica la presente propuesta de investigación son:	12
II.	MARCO TEÓRICO	13
2.1	Antecedente de estudio	13
2.2	Obtención de Ácido Peracético	15
2.3	Propiedades físicas de los reactantes y productos	16
2.4	Cinética química.....	17
2.5	Reactor batch.....	20
2.6	Evaluación de expresiones de velocidad a partir de datos experimentales.	25
2.7	Método Integral	25
III.	VARIABLES HIPOTESIS	30
3.1	Variables de la investigación.....	30
3.1.1	Variables independientes.....	30
3.1.2	Variables dependientes	30
3.2	Operacionalización de Variables.....	31
3.3	Formulación de hipótesis	32
3.3.1	Hipótesis general	32
3.3.2	Hipótesis específica	32

IV.	METODOLOGÍA	33
4.1	Tipo de investigación	33
4.2	Diseño de la Investigación	33
4.2.1	Plan de investigación.....	33
4.3	Técnicas e instrumentos de recolección de datos	34
4.4	Plan de análisis estadísticos de datos	35
4.5	Diseño Experimental.....	36
4.6	Procedimiento de análisis de datos.....	37
V.	RESULTADOS.....	39
5.1	Conversión fraccional en función de los parámetros de operación.....	39
5.2.	Conversión fraccional en función de los parámetros de operación.....	40
5.1	Determinación de la constante de equilibrio a partir de datos experimentales	58
5.2	Determinación de los Parámetros Cinéticos de la reacción de esterificación.....	59
VI.	DISCUSION DE RESULTADOS.....	65
6.1	Efecto de la concentración del catalizador en la reacción.....	65
6.2	Efecto de la relación de concentración inicial reactantes.....	66
6.3	Efecto de la temperatura en la reacción.....	67
6.4	Efecto de la agitación de la mezcla de los reactantes.....	68
	Efecto de la agitación de la mezcla de los reactantes en la conversión	68
IX.	REFERENCIALES	71
X.	APENDICE.....	73

Lista de Tablas

Tabla N°2.1 Propiedades Físicas de las Sustancias.....	17
Tabla N° 3.1 Matriz de Experimentos	31
Tabla N° 3.2 Plan de Experimentación	32
Tabla N°4.1 Variables Independientes y niveles de experimentación.....	36
Tabla N°4.2 Matriz de experimentación	37
Tabla N° 5.1 Conversión vs parámetros de operación del reactor.....	39
Tabla N° 5.2 Concentración Vs tiempo	40
Tabla N° 5.3 Concentración Vs tiempo	42
Tabla N° 5.4 Concentración Vs tiempo	44
Tabla N° 5.5 Concentración Vs tiempo	46
Tabla N° 5.6 Concentración Vs tiempo	48
Tabla N° 5.7 Concentración Vs tiempo	50
Tabla N° 5.8 Concentración Vs tiempo	52
Tabla N° 5.9 Concentración Vs tiempo	54
Tabla N° 5.10 Concentración Vs tiempo	56
Tabla N° 5.11 Constante de equilibrio experimental	58
Tabla N° 5.12 Constantes (k1) de velocidad directa de las experiencias	62
Tabla N° 5.13 Constantes (k1, k2) de velocidad a diferentes temperaturas	63
Tabla N° 5.14 Ecuaciones de velocidad de reacción	64

Lista de Gráficos

Gráfica N° 2.1 Concentración de la especie A y B en función del tiempo....	19
Gráfica N° 2.2 Reacción irreversible de primer orden	26
Gráfica N° 2.3 Reacción irreversible de segundo orden	27
Gráfica N° 2.4 Reacción reversible de segundo orden	28
Gráfica N° 5.1 Concentración Vs tiempo	41
Gráfica N°5.2 Conversión Vs tiempo	41
Gráfica N°5.3 Conversión Vs tiempo	43
Gráfica N°5.4 Conversión Vs tiempo	43
Gráfica N°5.5 Conversión Vs tiempo	45
Gráfica N°5.6 Conversión Vs tiempo	45
Gráfica N°5.7 Conversión Vs tiempo	47
Gráfica N°5.8 Conversión Vs tiempo	47
Gráfica N°5.9 Conversión Vs tiempo	49
Gráfica N°5.10 Conversión Vs tiempo	49
Gráfica N°5.11 Conversión Vs tiempo	51
Gráfica N°5.12 Conversión Vs tiempo	51
Gráfica N°5.13 Conversión Vs tiempo	53
Gráfica N°5.14 Conversión Vs tiempo	53
Gráfica N°5.15 Conversión Vs tiempo	55
Gráfica N°5.16 Conversión Vs tiempo	55
Gráfica N°5.17 Conversión Vs tiempo	57
Gráfica N°5.18 Conversión Vs tiempo	57
Gráfica N° 5.19 Reacción reversible de la Experiencia N°01.....	61
Grafico N° 6.1 Efecto de la concentración del catalizador en la conversión	65
Grafico N° 6.2 Efecto de la relación de reactantes en la conversión	66
Grafico N° 6.3 Efecto de la temperatura en la conversión	67
Gráfico N° 6.4 Efecto de la agitación de la mezcla de los reactantes en la conversión.....	68

Lista de Figuras

Figura N°2. 1: Representación esquemática de los reactores batch	20
Figura N° 2.2: Balance en un volumen de control	21
Figura N°3.1 Relación de variables	30
Figura N°4.1: Reactor con agitador magnético y calentador eléctrico	34
Figura N° 5.1 Reacción reversible de segundo orden	60

Resumen

El ácido peracético (PAA) es un gran agente antimicrobiano ideal, blanqueador relativamente eficiente y selectivo, debido a su alto potencial de oxidación. El PAA a menudo se usa como una alternativa al dióxido de cloro y al cloro elemental. Su aplicación no conduce a residuos tóxicos, es decir, la reacción genera subproductos amigables con el medio ambiente.

En este trabajo experimental se ha producido ácido peracético (PAA) mediante la reacción de soluciones acuosas de ácido acético y peróxido de hidrogeno, catalizado con ácido sulfúrico a nivel de laboratorio, haciendo uso de un reactor batch de 2 litros de capacidad.

Se ha evaluado la influencia de los parámetros de operación en la síntesis de ácido peracético como temperatura, relación molar de reactante, % en peso del catalizador y las RPM del sistema de agitación con respecto a la conversión del ácido acético.

Los resultados muestran que cuando el reactor opera a 40°C, relación molar de ácido con respecto al peróxido es de 2 a 1, el porcentaje en peso del catalizador es de 1% y operando el reactor a 100 RPM se alcanza la máxima conversión de 25%, en un tiempo de operación de 35 h. Así mismo, la constante de velocidad directa es de $k_1 = 1,3 \times 10^{-2} \frac{L}{mol \cdot h}$ y su expresión de velocidad $-r_A = 1,3 \times 10^{-2} C_A C_B - 7,3 \times 10^{-3} C_C C_D$

Summary

Peracetic acid (PAA) is a great ideal antimicrobial agent and a relatively efficient and selective bleaching agent because of its high oxidation potential. PAA is often used as an alternative to chlorine dioxide and elemental chlorine. Its application does not lead to toxic refuse, in other words, that reaction generates environmentally friendly by-products.

In this experimental work, engineers have produced peracetic acid (PAA) by reacting two aqueous solutions of acetic acid and hydrogen peroxide catalyzed by sulfuric acid at the laboratory level using a batch reactor, which had a capacity of 2 liters.

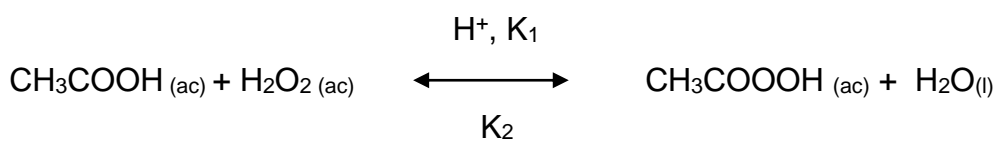
On the synthesis of peracetic acid, the influence of operating parameters, such as temperature, reactant molar ratio, catalyst weight percent and RPM of the reactor agitation system with regard to the conversion of acetic acid has been evaluated.

The results show that the maximum conversion of 25% is reached when the reactor operates at 40 °C, the molar ratio of acid to peroxide is 2 to 1, catalyst weight percent is 1% and the reactor works at 100RPM. That was made in 35 h of operation. Likewise, the direct velocity constant is: $k_1 = 1,3 \times 10^{-2} \frac{L}{mol h}$, and its expression of velocity is $-r_A = 1,3 \times 10^{-2} C_A C_B - 7,3 \times 10^{-3} C_C C_D$

I. INTRODUCCION

El ácido peracético es un fuerte desinfectante con un amplio espectro de actividad antimicrobiana. Tiene un diverso uso en servicios médicos y de higiene, también en desinfección de aguas residuales. Recientemente, el ácido peracético emerge como alternativa al convencional contenido de químicos con cloro, en un esfuerzo por desarrollar un proceso más amistoso con el medio ambiente en la industria de fabricación de pulpa y derivados del papel. También es un excelente componente activo para la epoxidación de triglicéridos insaturados para obtener plastificantes de bajo costo con una gran calidad a partir de la naturaleza y recursos renovables.

El pre tratamiento con ácido peracético ha demostrado mejoras en la digestibilidad enzimática de híbridos polares en el bagazo de caña de azúcar sin necesidad de alta temperatura. La preparación de ácido peracético mediante la reacción de ácido acético y peróxido de hidrógeno, catalizada por ácido sulfúrico es representada mediante la ecuación química.



Ésta reacción es reversible, la cual deriva en un equilibrio entre reactantes y productos. Unos pocos estudios muestran que la concentración de ácido peracético en equilibrio ha variado con la concentración de peróxido de hidrógeno usado, y la relación molar de ácido acético a peróxido de hidrógeno. La carga de catalizador ácido también difirió de 1 a 9%. (Zhao et al. 2007)

La constante de concentración de equilibrio (K_C) para esta reacción reversible está expresada como:

$$K_C = (C_{PAA}C_{H_2O})_e / (C_{AA}C_{HP})_e$$

La cinética de la formación de ácido peracético ha sido estudiada en reactores batch, Zhao estudió y desarrolló un modelo cinético para la preparación de ácido peracético de ácido acético y peróxido de hidrógeno usando un catalizador ácido en la fase líquida. Se reportó que la síntesis de ácido peracético fue una reacción de primer orden con respecto a las concentraciones de reactante y concentración H^+ .

El ácido peracético es una sustancia inestable debido a su rápida descomposición térmica, y por lo tanto, los aspectos de seguridad en la producción de ácido peracético necesitan ser considerados.

Dada esta razón, el estudio de las reacciones en pequeña escala es evidente. La seguridad del micro reactor está basada en un pequeño volumen de reacción, el cual también conlleva consecuentemente a un pequeño inventario de químicos peligrosos. Por otra parte, la eficiente transferencia de calor resultante a causa de la alta relación área de superficie de contacto- volumen, ofrece un eficiente control de temperatura y, por lo tanto, disminuye el riesgo de reacciones de escape. De este modo, el presente estudio sobre la preparación de ácido peracético fue llevada a cabo en un micro reactor.

1.1 Problema de Investigación

El ácido peracético (PAA) es un desinfectante ideal en sistemas de limpieza en las industrias de alimentos, bebidas, servicios médicos y desinfección de aguas residuales su aplicación no conduce a compuestos tóxicos, es decir la reacción generan subproductos amigables con el medio ambiente como oxígeno, agua y ácido acético que reemplaza a otros desinfectantes como el cloro, compuestos de amonio cuaternario y ozono. Las concentraciones típicas de PAA para fines de desinfección están en el rango de 6,6 - 13 mM.

Dado su bajo costo de fabricación, contribuye a la industria primaria de materiales, generando un crecimiento económico sostenible nacional.

En el presente trabajo el efecto de muchos parámetros tales como la relación molar, tiempo, temperatura y carga de catalizador han sido investigados en el micro estructurado reactor. El formado ácido peracético es altamente inestable y esta reacción toma más tiempo (más de 30 horas) en procesos batch. Debido a este superior tiempo de reacción, puede ocurrir la descomposición del producto. Adicionalmente, es muy difícil llevar a cabo este tipo de reacción altamente exotérmica en tanques reactores de agitación batch o continuos. También, si la reacción es rápida y fuertemente exotérmica, puede aparecer una no uniforme distribución de temperaturas y localizaciones calientes en tanques reactores de agitación batch o continuos. Tales problemas pueden ser fácilmente eliminados con el uso de un micro estructurado reactor, el cual opera en un fundamento continuo. Debido a las pequeñas dimensiones del micro estructurado reactor, las condiciones de reacción son más fáciles de mantener a causa de las superiores relaciones de transferencia de calor y masa. Adicionalmente el uso de catalizadores homogéneos tiene una desventaja de subsecuentemente separarse del producto. Por lo tanto, en el presente

trabajo, se va evaluar los parámetros de operación en la síntesis del ácido peracético

1.2 Formulación del problema

1.2.1 Problema General

¿Cómo será la síntesis del ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido etanoico catalizada con ácido sulfúrico en un reactor batch?

1.2.2 Problemas específicos

1. ¿Cuáles son los parámetros de operación del reactor batch para alcanzar mayor conversión?
2. ¿Cuáles son las características fisicoquímicas del ácido peracético producidas en el reactor batch
3. ¿Cuáles serán los parámetros cinéticos de síntesis del ácido peracético?

1.3 Objetivos de la investigación

1.3.1 Objetivo general

Sintetizar ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido etanoico catalizada con ácido sulfúrico.

1.3.2 Objetivos específicos

1. Identificar los parámetros de operación del reactor batch para alcanzar mayor conversión
2. Cuantificar las propiedades fisicoquímicas del ácido peracético producidas en el reactor batch
3. Determinar los parámetros cinéticos de síntesis del ácido peracético

1.4 **Justificación**

Las razones y motivos por las que se justifica la presente propuesta de investigación son:

1. **Económico:** Permitirá un ahorro en costos de obtención de cualquier tipo de producto a partir de reacción en fase líquida, el cual se verá reflejado en el control exacto de las condiciones necesarias de máxima cantidad obtenida por cantidad de insumo, mediante un modelo matemático. Dada la economía del Perú, es posible competir con productos importados de la misma línea aprovechando la localía por la no existencia de costos de flete internacionales. Favoreciendo el crecimiento y con ello, los sectores de siderurgia química primaria.
2. **Social:** Marcará como meta ayudar al desarrollo del país, la cual no posee mucha investigación en el área de la cinética química, aportando así conocimientos sobre la eficiencia de obtención de moléculas de ingrediente activo en fase líquida de cualquier tipo de producto, por este nuevo método, dando paso a futuros trabajos en la industria y la investigación.
3. **Tecnológico:** Se implementará un nuevo método y un respectivo modelo matemático que permita obtener con precisión las condiciones ideales para obtener la mayor cantidad de producto por cantidad de materia prima, con un aporte orientado para el uso en los laboratorios de la universidad.

II. MARCO TEÓRICO

2.1 Antecedente de estudio

A continuación, se presenta antecedentes de estudios que guardan relación directa con el objeto de estudio de esta investigación.

1. F. Ebrahimi, E. Kolehmainen, A. Laari, H. Haario, D. Semenov, I. Turunen **Determinación de la cinética de síntesis de ácidos percarboxílicos en un microreactor por modelo matemático** Departamento de tecnología química, matemática y física, Universidad de tecnología Lappeenranta, Finlandia, 5 de Setiembre de 2011 Para la síntesis de ácido perfórmico, la máxima temperatura de operación fue 313 K, Por encima de ello se observó la descomposición de los componentes en una fase gaseosa. Para el ácido peracético, la más alta temperatura fue 343 K, ya que temperaturas más altas resultan en descomposición.
2. Sebastien Leveneur, Dmitry Yu. Murzin, Tapio Salmi, Jyri-Pekka Mikkola, Narendra Kumar, Kari Eranen, Lionel Estel **Síntesis de Ácido peroxipropiónico a partir de ácido propiónico y peróxido de hidrógeno sobre catalizadores heterogéneos** Laboratorio de química industrial e Ingeniería de reacción, Centro de procesos químicos, Abo Akademi, Bislopsgatan, Finlandia Laboratoire de Sécurité des Procédés Chimiques, INSA Rouen, Place Emile Blondel, Mont Saint-Aignan Cedex, France 20 de noviembre del 2008. La principal ventaja de estos insumos es su inocuo impacto en el medio ambiente debido a la no-toxicidad de sus productos de descomposición. En efecto, la descomposición de estos componentes conduce a dióxido de carbono, oxígeno, agua y ácido carboxílico. Diferentes catalizadores sólidos ácidos,

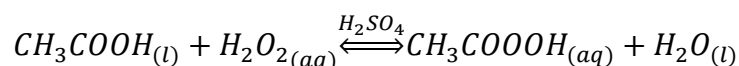
esencialmente zeolitas y resinas catiónicas de intercambio han sido probadas. Comparando con el ácido sulfúrico, se notó que la actividad está en escala similar, pero las resinas permiten bajar la acidez en una unidad de pH. Además, con los catalizadores heterogéneos de resina, el problema de la separación del catalizador es evitado. Los beneficios ambientales y de mantenimiento de uso de resinas catiónicas de intercambio, comparado al ácido sulfúrico, son importantes, esencialmente respecto a la posibilidad de usar menos mezcla corrosiva.

3. Zhao Xue-bing, Zhang Ting, Zhou Yu-jie, Liu De-hua; **Preparación de ácido peracético a partir de ácido acético y peróxido de hidrógeno: Experimentación y modelado** Instituto de química aplicada, departamento de ingeniería química, Universidad Tsinghua, Beijing, China Instituto de energía nuclear y de nueva tecnología, Universidad Tsinghua Beijing, China 30 de julio del 2007 La síntesis de ácido peracético a partir de ácido acético y peróxido de hidrógeno es un proceso ácido-catalizado, porque la reacción sigue un camino de protonación promovida. La experimentación y cálculo basada en modelo indican como resultado que la reacción fue obviamente facilitada para alcanzar el equilibrio por adición de ácido sulfúrico. De todas maneras, como equilibrio químico es un proceso dinámico, teóricamente, se necesita un tiempo infinitamente prolongado para que la reacción alcance el equilibrio. En la preparación práctica de ácido peracético, no es posible, no es necesario. Suponiendo que la actual concentración de ácido peracético dada como variable fue 99.5 % bajo estado de equilibrio, se puede considerar que la reacción en ese instante del tiempo ha alcanzado el equilibrio, y ese tiempo fue el que tomó la reacción para alcanzar el equilibrio, con tiempo inicial de la reacción igual a cero.

4. ZhaoXue-bing, Cheng Keke, Hao Junbin ,Liu De-hua; **Preparación de ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno Parte II: Cinética para la descomposición espontánea de ácido peracético en la fase líquida** Instituto de química aplicada, departamento de ingeniería química, Universidad Tsinghua, Beijing, China Instituto de energía nuclear y de nueva tecnología, Universidad Tsinghua Beijing, China, 4 de enero del 2008 Se halló que el quelante dietilnetriaminopentaacético ácido acético (DTPA) no fue muy efectivo para la reducción de la descomposición de ácido peracético en una solución fuertemente ácida, como sí cumplió ser efectivo en una solución acuosa alcalina o neutra. La adición de ácido sulfúrico puede obviamente disminuir la descomposición espontánea de ácido peracético. El modelo describe que la descomposición por debajo de 328 K fue tan insignificante que puede ser despreciable y la hidrólisis se convirtió en el predominante consumidor para el ácido peracético. Se demostró que el paso determinante para la descomposición espontánea de ácido peracético fue la reacción entre esta molécula y un intermediario carbonilo protón-activado.

2.2 Obtención de Ácido Peracético

El ácido Peracético se produce por la reacción de ácido acético y peróxido de hidrógeno en un medio acuoso que contiene ácido sulfúrico como catalizador. La reacción es de acuerdo a la siguiente ecuación:



La reacción puede acelerarse mediante la catálisis ácida o la eliminación de agua desplazando el equilibrio hacia la derecha según el principio de Lechatelier.

2.3 Propiedades físicas de los reactantes y productos

a) Ácido Acético

Líquido incoloro y corrosivo, de olor penetrante. La solución acuosa al 5-6% forma el vinagre; la solución muy concentrada (no menos del 99,5% de ácido acético) se llama ácido acético glacial.

Peligros: Es inflamable; el vapor irrita el sistema respiratorio, los ojos y la piel; causa quemaduras graves de los ojos y la piel; la ingestión produce irritación y lesiones.

b) Peróxido de Hidrogeno 50%

Líquido, límpido, incoloro, olor característico acre.

Peligros: Los efectos de la toxicidad se relacionan con sus propiedades altamente corrosivas y oxidantes. Favorece a la combustión con otras sustancias, ya que causa reacciones violentas o explosivas.

c) Ácido Peracético

Propiedades: Líquido incoloro y volátil, de olor agradable a fruta.

Peligros: Inflamable. Los efectos de la toxicidad se relacionan con sus propiedades altamente corrosivas. Favorece a la combustión con otras sustancias.

El producto se descompone rápidamente con liberación de oxígeno si se contamina con trazas metálicas, sustancias orgánicas y reductoras.

TABLA N°2.1
Propiedades Físicas de las Sustancias

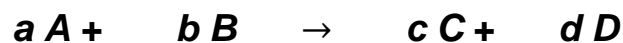
Sustancia	Formula	Peso molecular	Densidad(g/ml)	Punto de ebullición (°C)
ACIDO ACÉTICO	CH ₃ COOH	60,05	1,05	118
PERÓXIDO DE HIDROGENO	H ₂ O ₂	34,01	1,196	114
ÁCIDO PERACÉTICO	CH ₃ COOOH	76,05	1,13	105
AGUA	H ₂ O	18	1	100
ÁCIDO SULFÚRICO	H ₂ SO ₄	98,08	1,84	330

Fuente : Elaboracion propia

2.4 Cinética química

La Cinética química estudia la velocidad y mecanismo de las reacciones químicas.

La siguiente reacción química elemental tiene lugar en un sistema homogéneo, irreversible y cerrado:



La velocidad a la que se consume o forma cada especie es proporcional a su coeficiente estequiométrico (a,b,c y d) las velocidades relativas de reacción de las sustancias A y B

$$\frac{1}{a} \frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{b} \frac{dC_B}{dt}$$

las concentraciones de los reactivos en el tiempo disminuyen, y las de los productos aumentan, las diferenciales de los reactivos serán negativas, y la de los productos positivas.

$$r_j = -\frac{1}{a} \frac{dC_A}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{dC_B}{dt} = +\frac{1}{c} \frac{dC_C}{dt} = +\frac{1}{d} \frac{dC_D}{dt}$$

Donde :

r_j : velocidad de reacción en unidades de concentración por unidad de tiempo. (mol/L min).

La ecuación que expresa la velocidad de reacción como función de la temperatura y la composición se conoce como *ley de velocidad* y debe determinarse experimentalmente.

En su forma general la ley de velocidad para la ecuación 1

$$r_j = k(T)[A]^\alpha[B]^\beta[C]^\gamma$$

Donde:

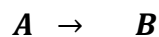
k : constante de velocidad que es función de la temperatura

$[A]$, $[B]$ etc. : Concentraciones de las especies químicas

$(\alpha, \beta, \text{etc})$:orden de reacción respecto a cada especie química.

La suma de estos coeficientes me da el orden global de la reacción.

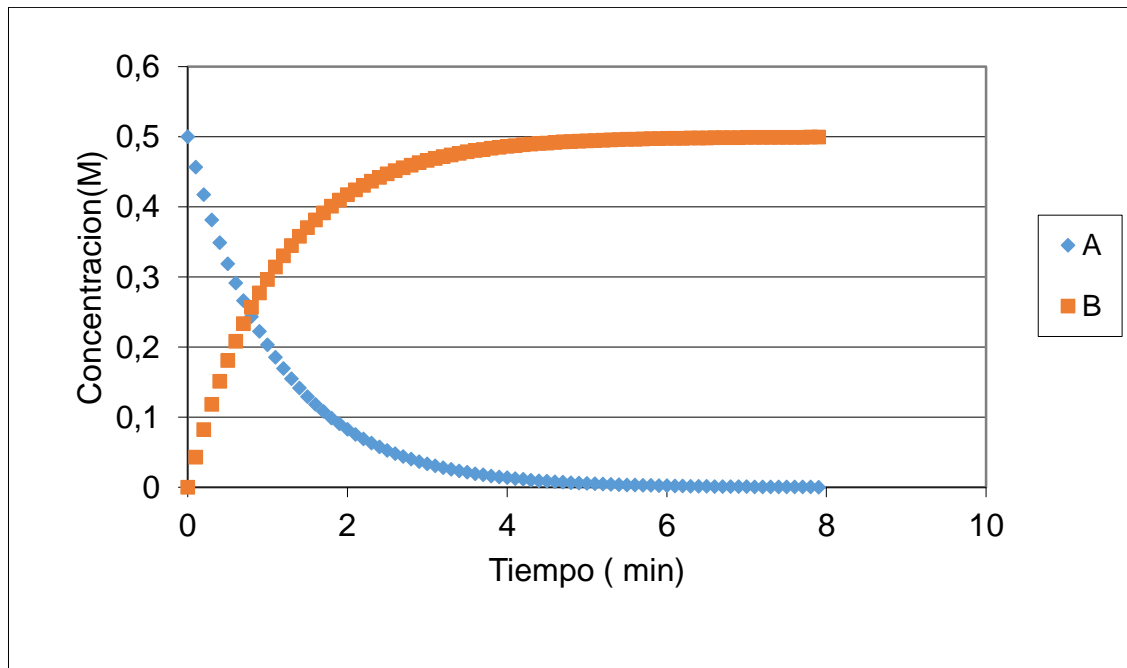
Supongamos la reacción elemental



De la gráfica N°2. 1 se observa la concentración de la especie A disminuye con el tiempo y la especie B aumenta de concentración en función del tiempo.

Grafica N° 2.1

Concentración de la especie A y B en función del tiempo



La relación entre las velocidades de A y B:

$$r_A = -\frac{dC_A}{dt} = +\frac{dC_B}{dt}$$

la pendiente de la curva concentración Vs. tiempo es la derivada de la concentración respecto al tiempo y por lo tanto es proporcional a la velocidad de reacción en ese punto. A esta velocidad se la llama velocidad de reacción instantánea.

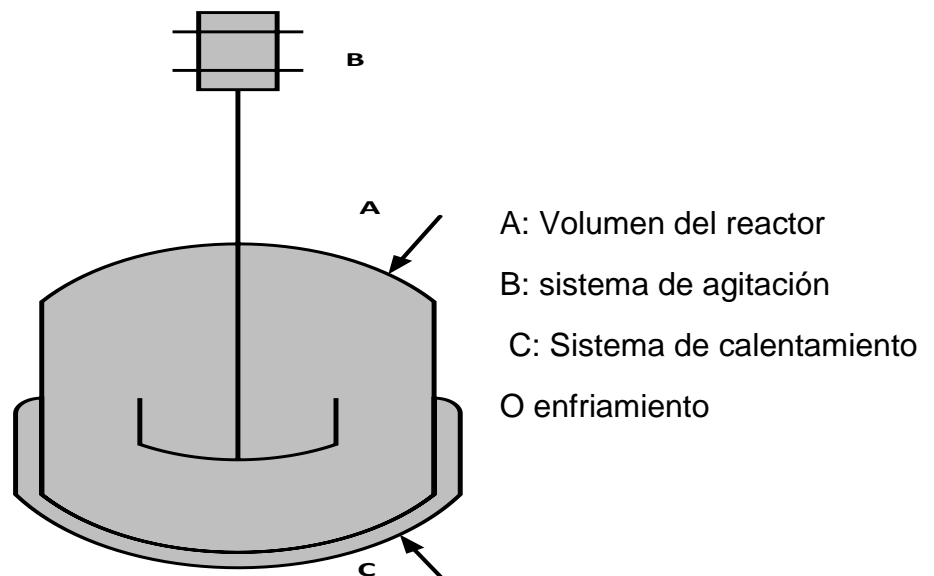
2.5 Reactor batch

Un reactor batch es un recipiente en donde se adicionan especies químicas que reaccionan y se produce un producto químico.

Los reactores discontinuos se usan para determinar la cinética de las reacciones químicas, donde la variación de una propiedad se observa a medida que avanza la reacción. Los datos recolectados generalmente consisten en cambios en variables como la concentración de los componentes, volumen total del sistema o una propiedad física como conductividad eléctrica. Los datos recogidos se analizan mediante ecuaciones para encontrar los parámetros cinéticos deseados.

Figura N°2. 1

Representación esquemática de los reactores batch



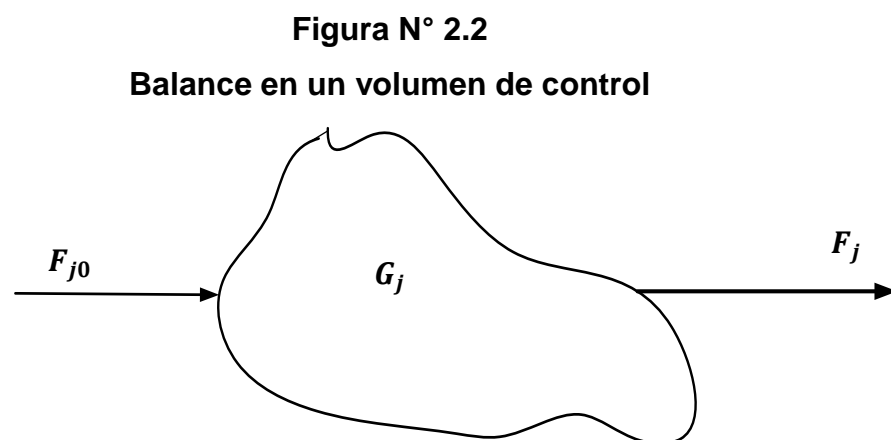
Fuente : Elaboracion propia

2.5.1 Características del Reactor Batch

1. Cada lote es un sistema cerrado.
2. La masa total de cada lote es fija.
3. El volumen o densidad de cada lote puede variar a medida que avanza la reacción.
4. La energía de cada lote puede variar a medida que avanza la reacción; Puede proporcionarse un intercambiador de calor para controlar la temperatura.
5. El tiempo de reacción (residencia) para elementos del fluido de reacción es el mismo
6. La composición del lote cambia con respecto al tiempo.
7. En cualquier tiempo, el lote es uniforme en composición, temperatura debido a la agitación.

2.5.2 Ecuación General de Balance de Materia

Vamos a realizar un balance de mol en especie j en un volumen del sistema, donde la especie j representa la especie químicas de interés, tales como es ácido acético en el este proyecto.



Un balance de mol de la especie j en cualquier instante de tiempo t, produce la siguiente ecuación.

Entrada – Salida + Generacion = Acumulacion

$$F_{j0} - F_j + G_j = \frac{dN_j}{dt}$$

Donde:

N_j : representa el número de moles de las especies j, en el tiempo t

F_{j0} : Flujo molar de entrada de la especie j, (mol/ unidad de tiempo)

F_j : Flujo molar de salida de la especie j, entrada (mol/ unidad de tiempo)

G_j : Generación o desaparición de la especie

$\frac{dN_A}{dt}$: El término diferencial es la acumulación

Si todas las variables del sistema (temperatura, actividad catalítica, Concentración de las especies químicas) son espacialmente uniformes.

$$F_{j0} - F_j + \int r_j V = \frac{dN_j}{dt}$$

A partir de esta ecuación general de balance molar podemos desarrollar el diseño Ecuaciones para los diversos tipos de reactores industriales tales como (Batch, PFR, Y CSTR).

En un reactor batch, no hay entrada ni salida de reactivos, mientras se lleva a cabo la reacción $F_{j0} = F_j = 0$

El resultado del balance molar general de la especie j es:

$$\frac{dN_j}{dt} = \int_0^V r_j dV$$

Si la mezcla de reacción se mezcla perfectamente de modo que no haya variación en La velocidad de reacción en todo el

volumen del reactor. Podemos escribir el equilibrio molar en la forma.

$$\frac{dN_j}{dt} = r_j V$$

2.5.3 Ecuación de diseño de un reactor batch

En la mayoría de los reactores discontinuos, cuanto más tiempo permanece un reactivo en el reactor, el reactivo se convierte en producto hasta alcanzar el equilibrio o se ha agotado el reactivo. Por consiguiente, en los sistemas de reacción, la conversión X es una función del tiempo que pasan los reactantes en el reactor. Si N_{A0} es el número de moles de A inicialmente en el reactor. Entonces el total Número de moles de A que han reaccionado después de un tiempo t es $N_{A0}X_A$

Moles de A consumidos: $N_A X_A$

El número de moles de A en el reactor después de una conversión X_A ha sido Logrado es

$$N_A = N_{A0}(1 - X_A)$$

Cuando no existen variaciones espaciales en la velocidad de reacción, el balance molar en La especie A para un sistema discontinuo viene dada por la ecuación

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V$$

Esta ecuación es válida tanto si el volumen del reactor es constante o variable En La reacción general. El reactivo A está desapareciendo

$$-\frac{dN_A}{dt} = -r_A V$$

Para los reactores discontinuos, estamos interesados en determinar cuánto tiempo los Reactivos en el reactor para

conseguir una cierta conversión X_A . Para determinar este lapso de tiempo, escribimos el balance molar en términos de Conversión fraccional con respecto al tiempo, recordando que N_{A0} es el número de moles de A presente inicialmente y es por lo tanto una constante con respecto al tiempo.

$$\frac{dN_A}{dt} = 0 - N_{A0} \frac{dX_A}{dt}$$

Combinando la ecuación

$$-N_{A0} \frac{dX_A}{dt} = r_A V$$

Para un reactor discontinuo, la ecuación de diseño en forma diferencial es:

$$N_{A0} \frac{dX_A}{dt} = -r_A V$$

Llamamos Ecuación la forma diferencial de la ecuación de diseño para un reactor Batch porque hemos escrito el equilibrio molar en términos de Conversión, las formas diferenciales de los balances molares del reactor discontinuo a menudo se utilizan en la interpretación de la tasa de reacción Datos y para reactores con efectos de calor, respectivamente. Los reactores discontinuos son Utilizado frecuentemente en la industria tanto para las reacciones en fase gaseosa como en fase líquida.

Para un reactor discontinuo de volumen constante $V = V_0$ La ecuación puede ser Dispuesto en la forma.

$$\frac{1}{V_0} \frac{dN_A}{dt} = \frac{d\left(\frac{N_A}{V_0}\right)}{dt} = \frac{dC_A}{dt} = r_A$$

$$\frac{dC_A}{dt} = r_A$$

El tiempo, t , necesario para reducir el número de moles de N_{A0} a N_{A1} se indica mediante la siguiente ecuacion.

$$t = \int_{N_{A1}}^{N_{A0}} \frac{dN_A}{-r_A V} = - \int_{C_{A0}}^{C_{A1}} \frac{dC_A}{-r_A} = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dx_A}{r_A}$$

2.6 Evaluación de expresiones de velocidad a partir de datos experimentales.

La determinación de la expresión cinética y los parámetros cinéticos debe basarse a partir de resultados experimentales. Para el análisis podemos emplear el método integral.

2.7 Método Integral

Dado un conjunto de datos C_{Ai} y t_i se determina k y α a partir de la expresión cinética. $r_A = kC_A^\alpha$

2.7.1 Reacciones de orden 1 ($\alpha = 1$)

Consideramos: $A \rightarrow B$

La ecuación diferencial para esta reacción es: $-\frac{dC_A}{dt} = r_A = kC_A$

Integrando para $t=0$ es C_{A0} y para t es C_A

$$\ln \left[\frac{C_{A0}}{C_A} \right] = kt \quad \rightarrow \quad C_A = C_{A0} e^{-kt}$$

En términos de conversión: $\ln(1 - X_A) = -kt$

Donde:

C_{A0} Concentración Inicial de la especie A,

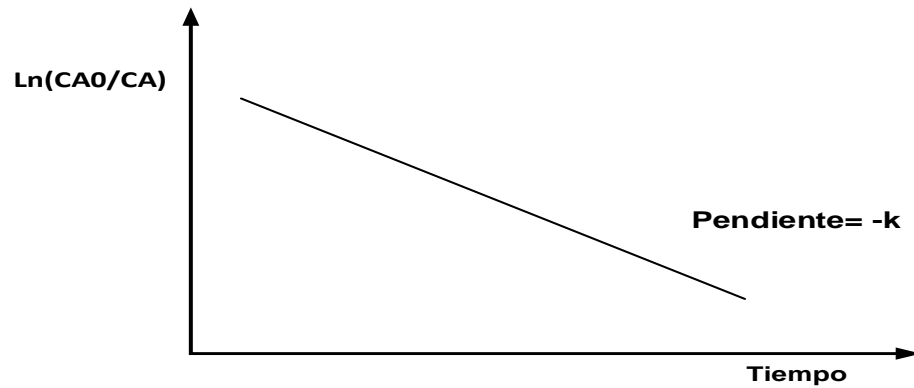
C_A Concentración de A al tiempo t ,

k constante de velocidad (1/s).

Si se grafica el logaritmo de la concentración de reactivo en función del tiempo se obtiene una recta de cuya pendiente es la constante de velocidad.

Grafica N° 2.2

Reacción irreversible de primer orden



Fuente : Elaboracion propia

2.7.2 Reacciones de orden 2

Consideremos la reacción: $A + B \rightarrow C$

Considerando que existen iguales concentraciones iniciales de A y B, cómo reacciona mol a mol, la variación de A será igual a la variación de B. Así podemos escribir

$$-r_A = -\frac{dc_A}{dt} = kC_A^2 \quad \text{Integrando tenemos}$$

$$\frac{1}{C_A} = \frac{1}{C_{A0}} + kt$$

Donde:

C_{A0} : Concentración Inicial de la especie A, C_A concentración de A al tiempo t

k : constante de velocidad (L/mol min)

En términos de conversión

$$\frac{X_A}{1 - X_A} = k C_{A0} t$$

Para una reacción de segundo orden, una gráfica de la inversa de la concentración de reactivo Vs. tiempo dará una

recta de cuya pendiente puede obtenerse la constante de velocidad.

2.7.3 Reacción irreversible de orden 2

Sea la reacción: $A + B \rightarrow P$

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A C_B$$

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = C_{A0} \frac{dX_A}{dt} = kC_{A0}^2 (1 - X_A)(m - X_A)$$

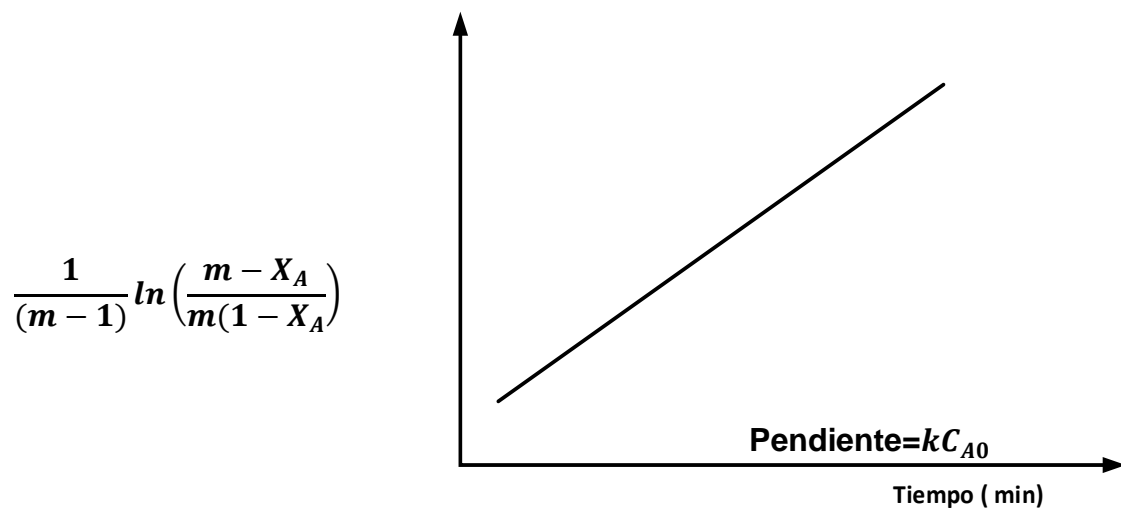
$$m = \frac{C_{B0}}{C_{A0}}$$

Integrando

$$\frac{1}{m-1} \ln\left(\frac{m-X_A}{m(1-X_A)}\right) = C_{A0}kt$$

Gráfica N° 2.3

Reacción irreversible de segundo orden



Fuente : Elaboracion propia

2.7.4 Reacción reversible de orden 2

Sea la reacción: $A + B \leftrightarrow C + D$

$$C_{A0} = C_{B0} \quad \text{y} \quad C_{C0} = 0 ; C_{D0} = 0$$

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 C_A C_B - k_2 C_C C_D$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_1 [C_{A0}(1 - X_A)C_{A0}(1 - X_A)] - k_2 (C_{A0}X_A)C_{A0}X_A$$

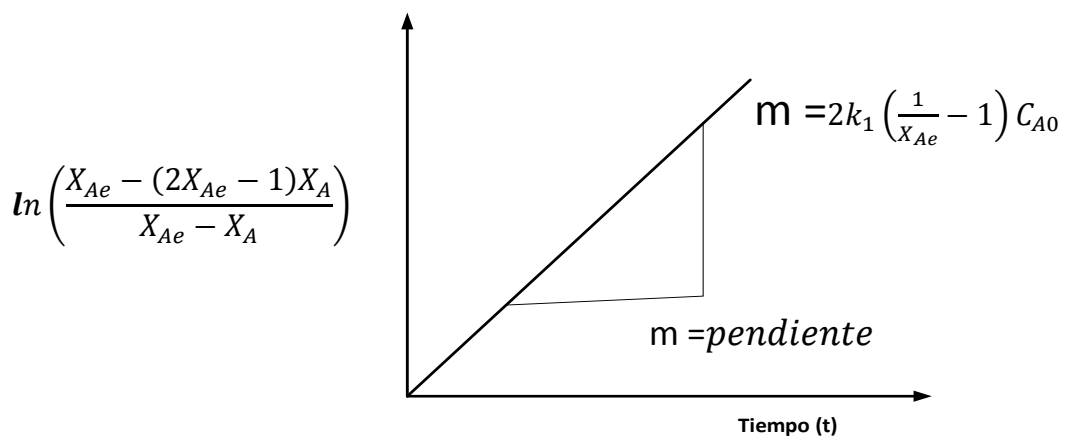
Resolviendo la integral

$$\ln\left(\frac{X_{Ae} - (2X_{Ae} - 1)X_A}{X_{Ae} - X_A}\right) = 2k_1\left(\frac{1}{X_{Ae}} - 1\right)C_{A0}t$$

Tiene la forma de una recta que parte desde el inicio:

Grafica N° 2.4

Reacción reversible de segundo orden



Fuente : Elaboracion propia

2.8 Constante de Equilibrio

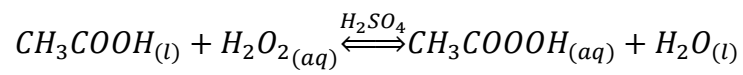
Para la reacción general



$$K_C = \frac{k_1}{k_2} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

La unidad de K_C es $\left(\frac{\text{mol}}{\text{L}}\right)^{d+c-a-b}$

Para la reacción



$$K_{eq} = \frac{k_1}{k_2} = \frac{[CH_3COOOH][H_2O]}{[CH_3COOH][H_2O_2]}$$

III. VARIABLES HIPOTESIS

3.1 Variables de la investigación

La presente investigación se caracteriza por ser de naturaleza transversal estudia el comportamiento de las variables en un tiempo determinado, se busca determinar la relación causa efecto. Por su naturaleza, todas las variables identificadas son del tipo cuantitativas. Por su dependencia Y_1 e Y_2 son dependiente, y las variables X_1 , X_2 y X_3 son independientes. Es decir: $Y=f(X_1, X_2, X_3 \text{ y } X_4)$

3.1.1 Variables independientes

X_1 = Relación molar de los reactantes

X_2 = Temperatura

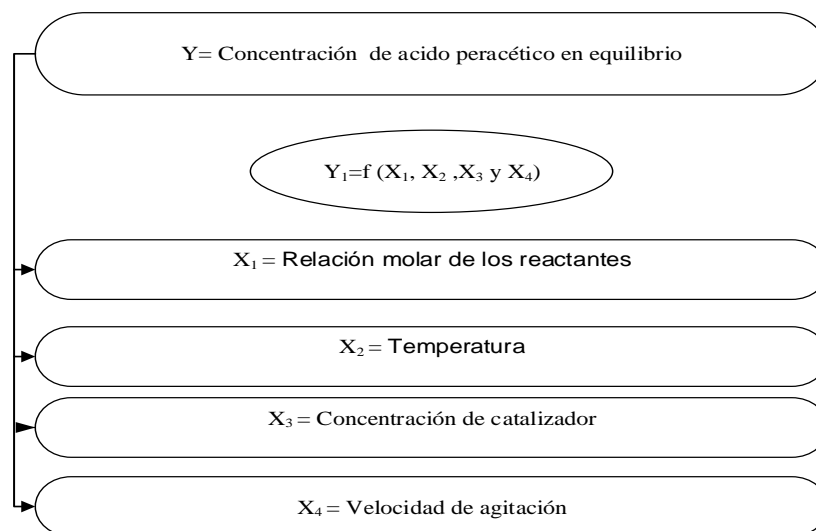
X_3 = Concentración de catalizador

X_4 = Velocidad de agitación

3.1.2 Variables dependientes

Y = Concentración de ácido peracético en el equilibrio

Figura N°3.1 Relación de variables



Fuente: Elaboración propia

3.2 Operacionalización de Variables

Se hará el uso del método del diseño factorial (3^4). En la tabla se muestra la matriz de experimentación para el diseño factorial elegida de 4 factores a 3 niveles.

TABLA N° 3.1
Matriz de Experimentos

N°	VARIABLES	NOTACION	NIVEL bajo	NIVEL medio	NIVEL alto
1	Relación de reactantes (g/L)	X1	0,5	1	2
2	Temperatura (°C)	X2	T0	35	50
3	Concentración de catalizador (%)	X3	0,1	0,5	1
4	Velocidad de agitación(rpm)	X4	100	200	300

Fuente: Elaboración Propia

En las primeras tres columnas se dan los factores codificados y en las tres siguientes se dan los factores a su valor real. Se hicieron dos repeticiones de cada combinación y se muestra el orden de los experimentos.

Y1: % de conversión

Y2: % del ácido peracético

TABLA N° 3.2
Plan de Experimentación

N°	X1	X2	X3	X4	Relación Molar	Temperatura	Concentración	Velocidad de agitación
1	1	1	1	1	0,5	19	0,1	100
2	1	2	2	2	0,5	35	0,5	200
3	1	3	3	3	0,5	50	1	300
4	2	1	2	3	1	19	0,5	300
5	2	2	3	1	1	35	1	100
6	2	3	1	2	1	50	0,1	200
7	3	1	3	2	2	19	1	200
8	3	2	1	3	2	35	0,1	300
9	3	3	2	1	2	50	0,5	100

Fuente: Elaboración Propia

3.3 Formulación de hipótesis

3.3.1 Hipótesis general

La síntesis de ácido peracético se llevará a cabo con los parámetros más adecuados que otorguen la máxima conversión de reacción.

3.3.2 Hipótesis específica

1. Al identificar los parámetros de operación (temperatura, relación molar de reactantes, % de ácido sulfúrico y tiempo de reacción) y los niveles más adecuados de operación se obtendrá una alta conversión
2. Determinando las características fisicoquímicas del ácido peracético (concentración, densidad) obtendremos un producto de calidad.
3. Al determinar los parámetros cinéticos de reacción (constante de velocidad, orden de reacción) se obtendrá la expresión cinética de la velocidad de reacción

IV. METODOLOGÍA

4.1 Tipo de investigación

La investigación es de tipo experimental, consiste en la construcción de un modelo matemático de la velocidad de reacción de síntesis y su evaluación de las variables de operación en condiciones rigurosamente controladas, con el fin de describir el proceso de obtención de ácido peracético.

4.2 Diseño de la Investigación

La investigación se llevó a cabo en el laboratorio de investigación de la empresa INDUSTRIAS DQ S.A.C

4.2.1 Plan de investigación

1. Compra del reactor, materiales y accesorios para la puesta en marcha del equipo experimental
2. Acondicionamiento
Se acondiciono el reactor en la instalación eléctrica, sistema de calentamiento y sistema de control de temperatura y condensador de vapores.
3. Experimentación
Se ha procedido la experimentación de acuerdo al diseño experimental mediante la metodología Taguchi de **4 variables a 3 niveles (3⁴)**. Empezando con las de temperatura ambiente
4. Procedimiento
Se adiciona las soluciones de peróxido de hidrógeno, ácido acético, y el catalizador de acuerdo a plan de experimentación y se regula las RPM del sistema de agitación acético
5. Metodología analítica
La concentración de la solución de ácido peracético se ha determinado analizándolo vía análisis volumétrico a partir de peróxido de hidrógeno y ácido peracético.

4.3 Técnicas e instrumentos de recolección de datos

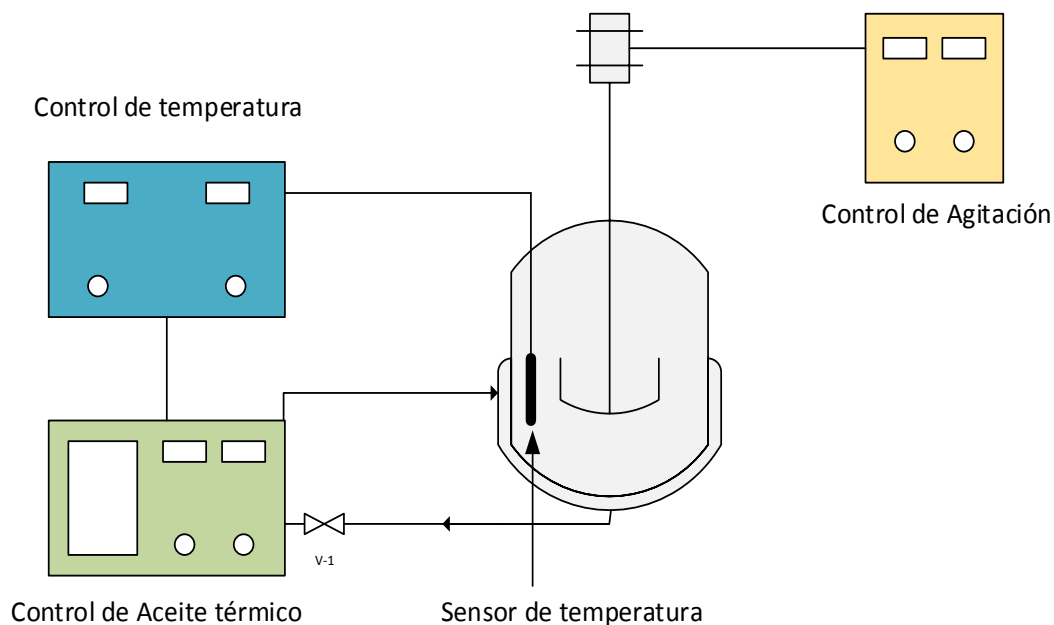
4.3.1 Equipo Experimental

El equipo experimental consiste en un reactor de vidrio, 2L de capacidad, Incorporado un condensador. Un agitador magnético para homogenizar la mezcla de reacción. El reactor contiene un termostato para la regulación de la temperatura.

Contiene un tanque de aceite térmico con una resistencia eléctrica para calentar y una bomba para recircular el aceite por la chaqueta del reactor

FIGURA N°4.1

Reactor con agitador magnético y calentador eléctrico



Fuente : Elaboracion propia

4.3.2 Otros materiales

Buretas, pipetas, vasos de precipitado, probetas de 5 mL,

4.3.3 Reactivos

- Tiosulfato de sodio 0,01 molar
- Indicador Ferroína
- Ácido sulfúrico (H₂SO₄) de 98%
- Ioduro de potasio
- Peróxido de hidrogeno 50%
- Ácido Acético Glacial 99,98%
- Agua destilada

4.3.4 Técnica de recolección

El reactor se colocó a la temperatura indicada de acuerdo al diseño experimental. Después de alcanzar la temperatura deseada, se adicióno el catalizador. Este momento fue considerado como el comienzo de la reacción, Se regulo el nivel de agitación según la experiencia. Se tomaron dos muestras de 0,5 g por cada intervalo de tiempo. Al comienzo de los experimentos, se tomaron muestras a intervalos frecuentes, pero hacia el final de los experimentos, Las condiciones de operación de las pruebas experimentales se indica en la tabla N° 4.1 y 4.2

4.4 Plan de análisis estadísticos de datos

Los parámetros experimentales estarán sujetos a la temperatura de operación de la solución entre 25°C y 40°C, ya que la estabilidad del ácido peracético depende de la temperatura de operación.

1. Uso de tablas y gráficos de datos.
2. Determinación de la conversión.

3. Gráficas para reportar resultados de conversión a diferentes concentraciones y temperaturas de trabajo operantes dentro del reactor.

4.4.1 Población de la Investigación

Para el desarrollo de la investigación se preparó muestras de un volumen de 1,4 L a diferentes concentraciones de ácido acético y peróxido de hidrógeno a partir de sustancias puras. Las concentraciones y volumen de mezcla se muestran en la Tabla N° 4.1 y 4.2.

4.5 Diseño Experimental

Para el desarrollo de las pruebas experimentales las variables independientes identificadas y niveles se muestran en la Tabla N° 4.1 y 4.2. La influencia de la conversión se ha estudiado mediante la combinación de las variables independientes a tres niveles.

La matriz de experimentos se muestra en la tabla N°4.2

Tabla N°4.1:

Variables Independientes y niveles de experimentación

N°	Variables Independientes	Notación	Nivel bajo	Nivel medio	Nivel alto
1	Relación de moles (ácido/peróxido)	X_1	1/2	1/1	2/1
2	Temperatura (°C)	X_2	20	30	40
3	Concentración catalizador (%)	X_3	0,1%	0,5%	1%
4	Velocidad de agitación (rpm)	X_4	100	200	300

Fuente : Elaboracion propia

N° Experiencia	X1	X2	X3	X4
1	1:2	20	0,1	100
2	1:2	30	0,5	200
3	1:2	40	1	300
4	1:1	20	0,5	300
5	1:1	30	1	100
6	1:1	40	0,1	200
7	2:1	20	1	200
8	2:1	30	0,1	300
9	2:1	40	0,5	100

Tabla N°4.2:

Matriz de experimentación

Fuente : Elaboracion propia

4.6 Procedimiento de análisis de datos

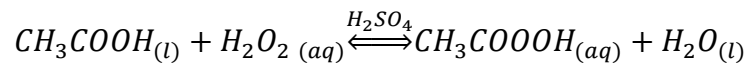
Con el fin de monitorizar la velocidad de la reacción en estos experimentos, es necesario determinar la cantidad de ácido acético sin reaccionar a intervalos de tiempo apropiados. La mezcla de reacción se puede monitorizar utilizando un método de titulación.

4.6.1 Método titulación

Se recoge una pequeña muestra del recipiente de reacción (0.5g) El ácido peracético se titula con tiosulfato de sodio. Utilizando un kit de reconocimiento (ioduro de potasio y ácido sulfúrico 34%) y como indicador la ferroína. A partir de esta valoración se determina la cantidad de ácido peracético que ha reaccionado. Se utiliza una bureta de 25 ml para valorar las muestras.

4.6.2 Evaluación de la cinética de reacción

1. Ecuación estequiometria



2. Postulado de expresión cinética

$$-r_A = k_1 C_A C_B - k_2 C_C C_D$$

Donde k_1 y k_2 son desconocidos

3. Seleccionar el tipo de reactor y el correspondiente balance molar

$$\text{Para un reactor batch : } -\frac{dC_A}{dt} = r_A$$

4. Procese sus datos en términos de variables medidas.
En este caso C_A vs tiempo

5. Ejecute los experimentos

Operación no isotérmica a diferentes temperaturas para ver el efecto de la temperatura en la constante de reacción k.

V. RESULTADOS

5.1 Conversión fraccional en función de los parámetros de operación

En la siguiente tabla se muestra los resultados de la conversión de acuerdo al diseño de experimentos propuesto, como se indica en la

N° Experiencia	X1	X2	X3	X4	Conversión en Equilibrio (%)
1	1:2	20	0,1	100	15,7
2	1:2	30	0,5	200	17,96
3	1:2	40	1	300	22,7
4	1:1	20	0,5	300	21,93
5	1:1	30	1	100	24,6
6	1:1	40	0,1	200	21,97
7	2:1	20	1	200	24,9
8	2:1	30	0,1	300	19,81
9	2:1	40	0,5	100	26,09

tabla N° 5.1

Tabla N° 5.1
Conversión vs parámetros de operación del reactor

Fuente : Elaboracion propia

5.2. Conversión fraccional en función de los parámetros de operación

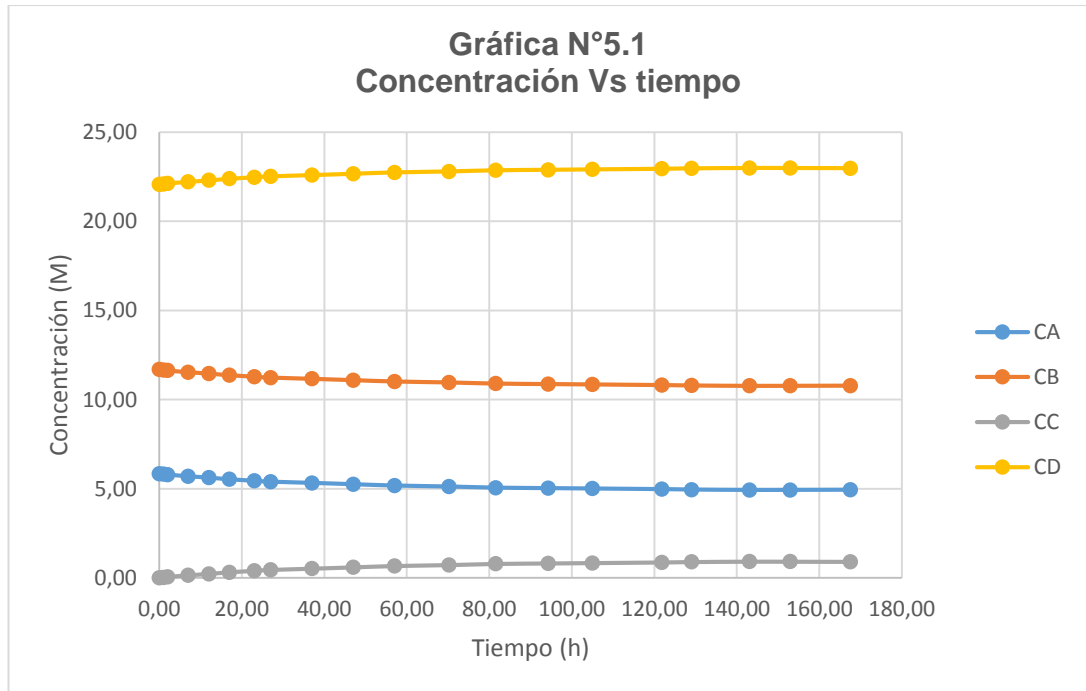
En las siguientes tablas se muestra los resultados de la concentración y conversión de acuerdo al diseño de experimentos propuesto

Tabla N° 5.2
Concentración Vs tiempo
 Concentración Vs tiempo a las condiciones de operación
 $X_1 = 1/2$, $X_2 = 20\text{ }^\circ\text{C}$, $X_3 = 0,1\%$ Catalizador y $X_4 = 100\text{ rpm}$

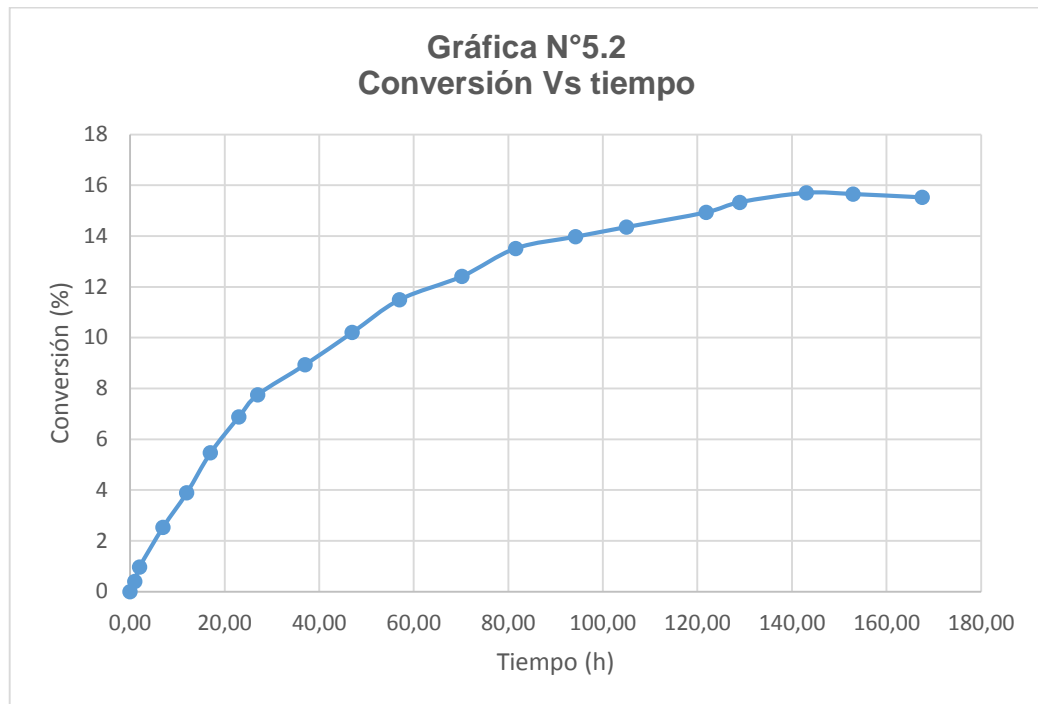
N°	Tiempo(h)	$[c_{HAC}]$	$[c_{H_2O_2}]$	$[c_{APA}]$	$[c_{H_2O}]$	Conversión (%)
1	0,00	5,85	11,69	0	22,06	0
2	1,00	5,82	11,66	0,02	22,09	0,4
3	2,00	5,79	11,63	0,06	22,12	0,97
4	6,95	5,70	11,54	0,15	22,21	2,53
5	12,00	5,62	11,46	0,23	22,29	3,89
6	17,00	5,53	11,37	0,32	22,38	5,46
7	23,00	5,44	11,28	0,40	22,47	6,88
8	27,00	5,39	11,23	0,45	22,52	7,75
9	37,00	5,32	11,16	0,52	22,59	8,93
10	47,00	5,25	11,09	0,60	22,66	10,2
11	57,00	5,17	11,01	0,67	22,74	11,49
12	70,18	5,12	10,96	0,73	22,79	12,41
13	81,55	5,06	10,90	0,79	22,85	13,51
14	94,23	5,03	10,87	0,82	22,88	13,97
15	105,00	5,01	10,85	0,84	22,90	14,35
16	121,85	4,97	10,81	0,87	22,94	14,93
17	129,00	4,95	10,79	0,90	22,96	15,33
18	143,05	4,93	10,77	0,92	22,98	15,7

19	152,97	4,93	10,77	0,92	22,98	15,65
20	167,55	4,94	10,78	0,91	22,97	15,52

Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia

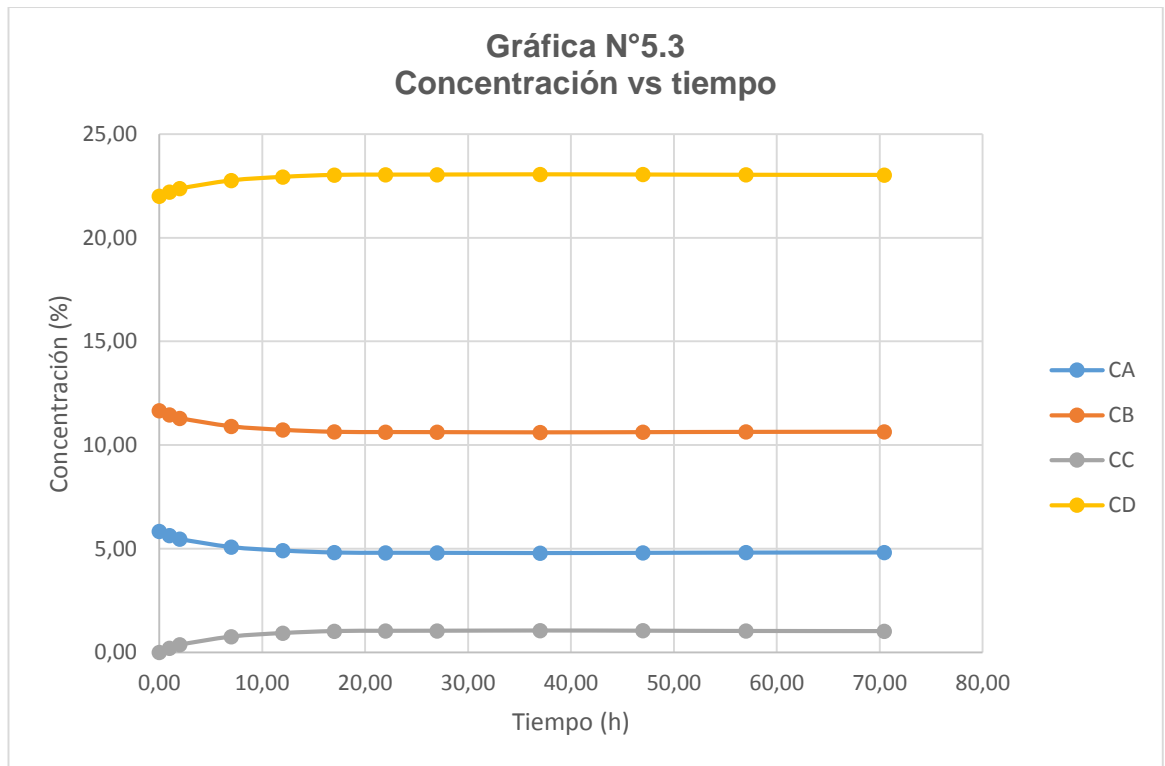
Tabla N° 5.3
Concentración Vs tiempo

Concentración Vs tiempo a las condiciones de operación
 $X_1 = 1/2$, $X_2 = 30\text{ °C}$, $X_3 = 0.5\%$ Catalizador y $X_4 = 200\text{ rpm}$

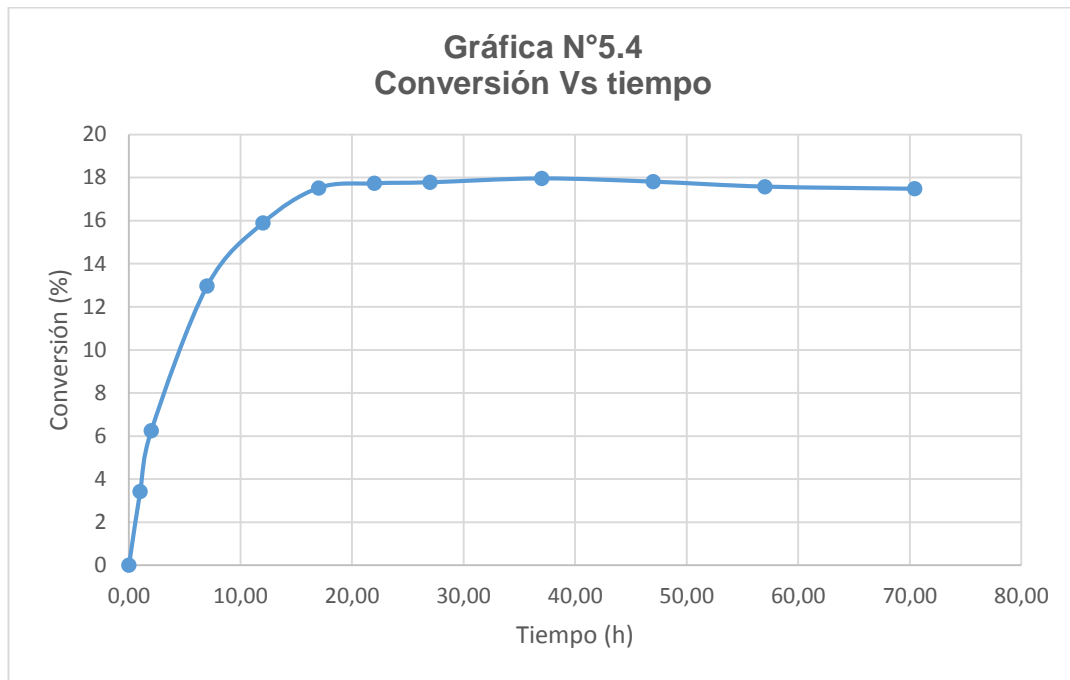
N°	Tiempo(h)	$[c_{HAC}]$	$[c_{H_2O_2}]$	$[c_{APA}]$	$[c_{H_2O}]$	Conversión (%)
1	0,00	5,83	11,66	0	22,01	0
2	1,00	5,63	11,46	0,20	22,21	3,42
3	2,00	5,47	11,29	0,36	22,37	6,25
4	7,00	5,08	10,90	0,76	22,76	12,96
5	12,00	4,90	10,73	0,93	22,93	15,89
6	17,00	4,81	10,63	1,02	23,03	17,52
7	22,00	4,80	10,62	1,03	23,04	17,73
8	27,00	4,79	10,62	1,04	23,04	17,78
9	37,00	4,78	10,61	1,05	23,06	17,96

10	47,00	4,79	10,62	1,04	23,05	17,81
11	57,00	4,81	10,63	1,03	23,03	17,58
12	70,43	4,81	10,64	1,02	23,03	17,48

Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia

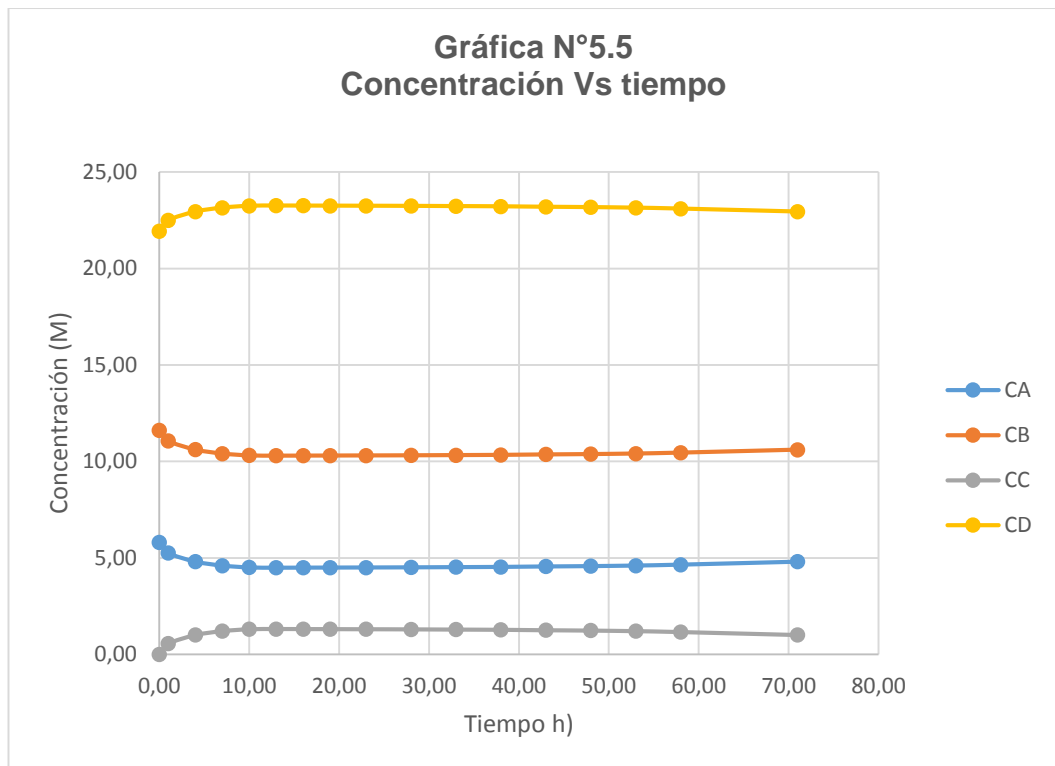
**Tabla N° 5.4
Concentración Vs tiempo**

Concentración Vs tiempo a las condiciones de operación
 $X_1 = 1/2$, $X_2 = 40$ °C, $X_3 = 1$ % Catalizador y $X_4 = 300$ rpm

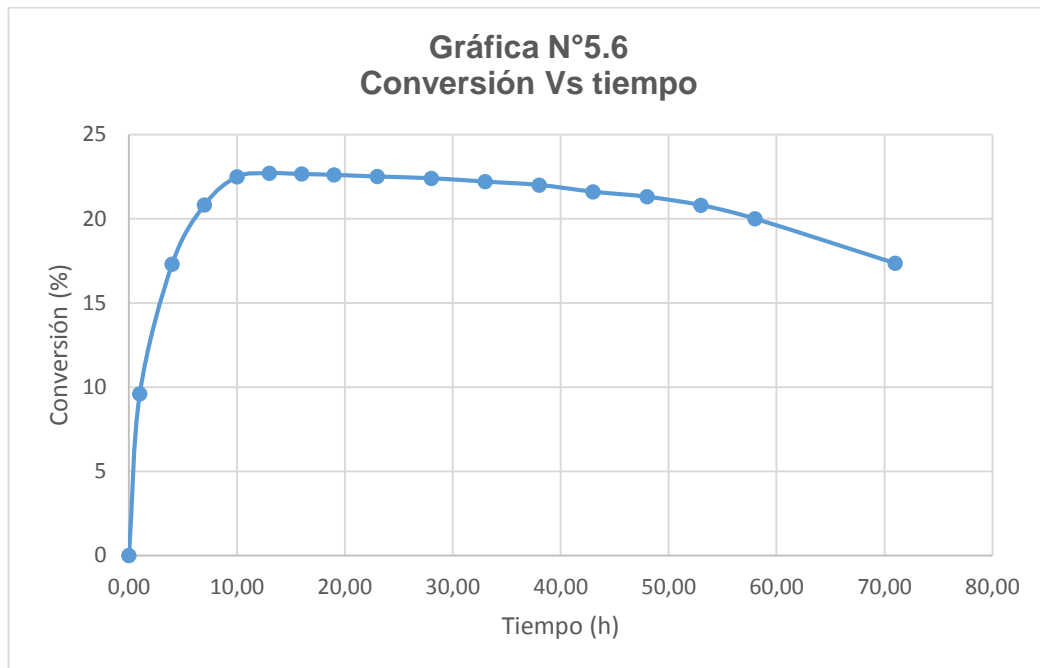
N°	Tiempo(h)	$[C_{HAC}]$	$[C_{H_2O_2}]$	$[C_{APA}]$	$[C_{H_2O}]$	Conversión (%)
1	0,00	5,81	11,62	0	21,94	0
2	1,00	5,25	11,06	0,56	22,49	9,6
3	4,00	4,81	10,61	1,01	22,94	17,3
4	7,00	4,60	10,41	1,21	23,15	20,82
5	10,00	4,51	10,31	1,31	23,24	22,48
6	13,00	4,49	10,30	1,32	23,26	22,7
7	16,00	4,50	10,30	1,32	23,25	22,65
8	19,00	4,50	10,30	1,31	23,25	22,6
9	23,00	4,50	10,31	1,31	23,24	22,5

10	28,00	4,51	10,32	1,30	23,24	22,4
11	33,00	4,52	10,33	1,29	23,23	22,2
12	38,00	4,53	10,34	1,28	23,22	22
13	43,00	4,56	10,36	1,26	23,19	21,6
14	48,00	4,57	10,38	1,24	23,17	21,3
15	53,00	4,60	10,41	1,21	23,15	20,8
16	58,00	4,65	10,46	1,16	23,10	20
17	71,00	4,80	10,61	1,01	22,95	17,35

Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia

Tabla N° 5.5

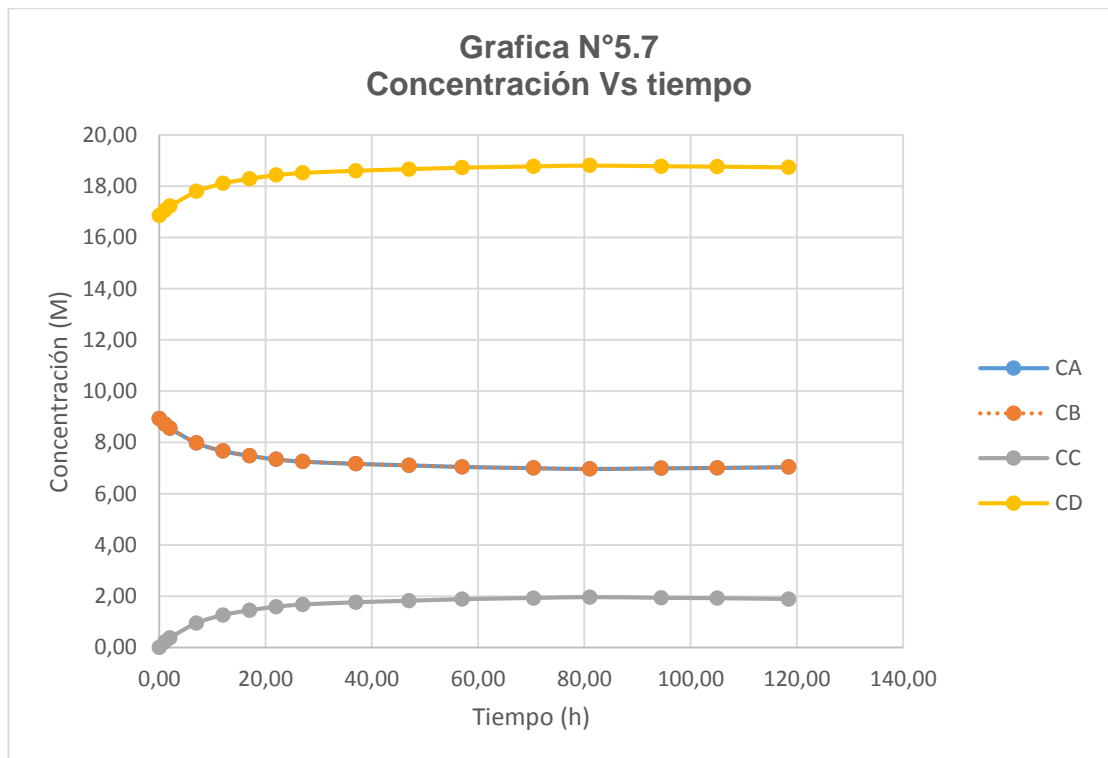
Concentración Vs tiempo

Concentración Vs tiempo a las condiciones de operación
 $X_1 = 1/1$, $X_2 = 20\text{ °C}$, $X_3 = 0.5\%$ Catalizador y $X_4 = 300\text{ rpm}$

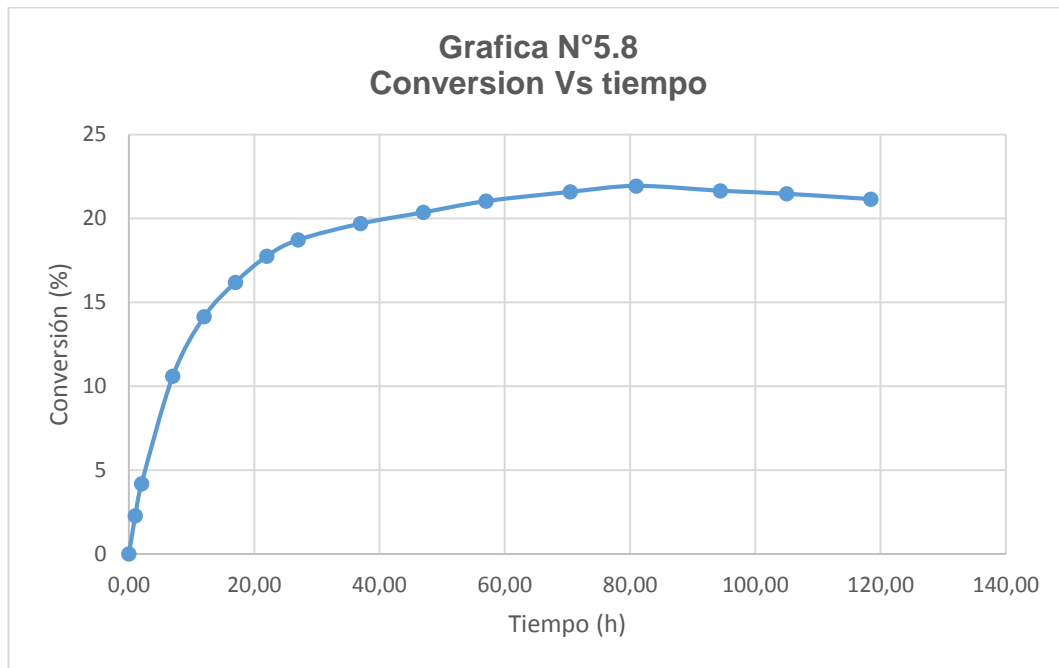
N°	Tiempo(h)	$[C_{HAC}]$	$[C_{H_2O_2}]$	$[C_{APA}]$	$[C_{H_2O}]$	Conversión (%)
1	0,00	8,93	8,93	0	16,85	0
2	1,00	8,72	8,72	0,20	17,06	2,27
3	2,00	8,55	8,55	0,37	17,23	4,17
4	7,00	7,98	7,98	0,95	17,80	10,59
5	12,00	7,66	7,66	1,26	18,11	14,13
6	17,00	7,48	7,48	1,44	18,30	16,18
7	22,00	7,34	7,34	1,58	18,44	17,74
8	27,00	7,26	7,26	1,67	18,52	18,71
9	37,00	7,17	7,17	1,76	18,61	19,68

10	47,00	7,11	7,11	1,82	18,67	20,35
11	57,00	7,05	7,05	1,88	18,73	21,02
12	70,43	7,00	7,00	1,93	18,78	21,57
13	81,00	6,97	6,97	1,96	18,81	21,93
14	94,43	6,99	6,99	1,93	18,78	21,64
15	105,00	7,01	7,01	1,92	18,77	21,46
16	118,43	7,04	7,04	1,89	18,74	21,14

Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia

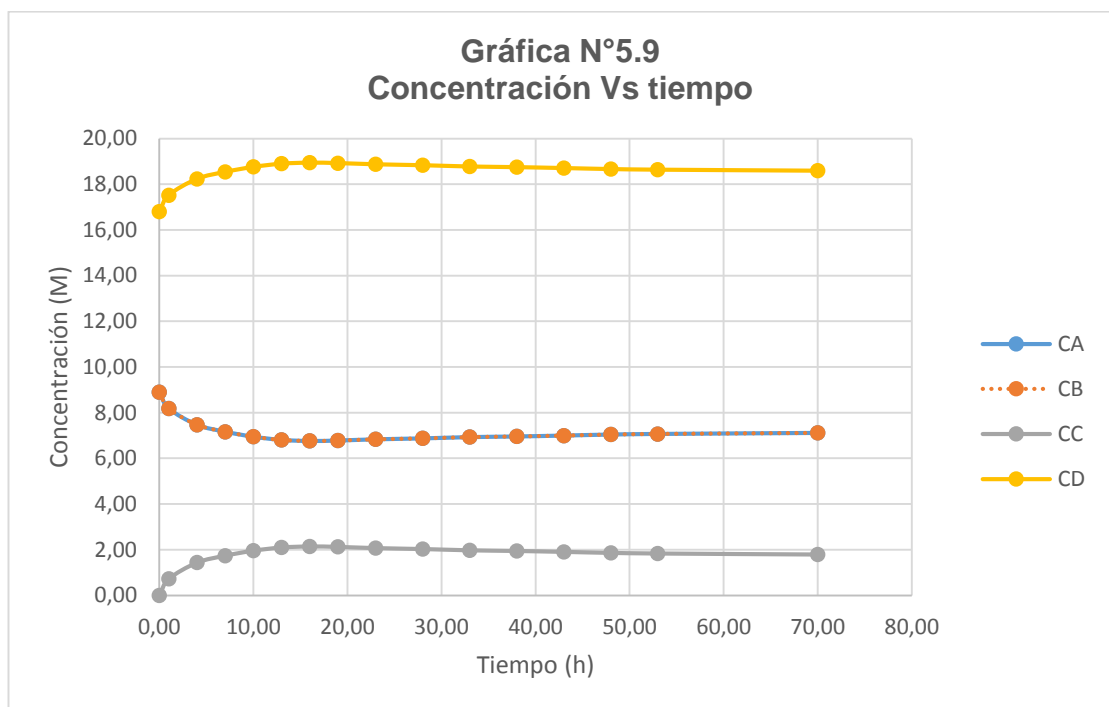
Tabla N° 5.6
Concentración Vs tiempo

Concentración Vs tiempo a las condiciones de operación
 $X_1 = 1/1$, $X_2 = 30\text{ }^\circ\text{C}$, $X_3 = 1\%$ Catalizador y $X_4 = 100\text{ rpm}$

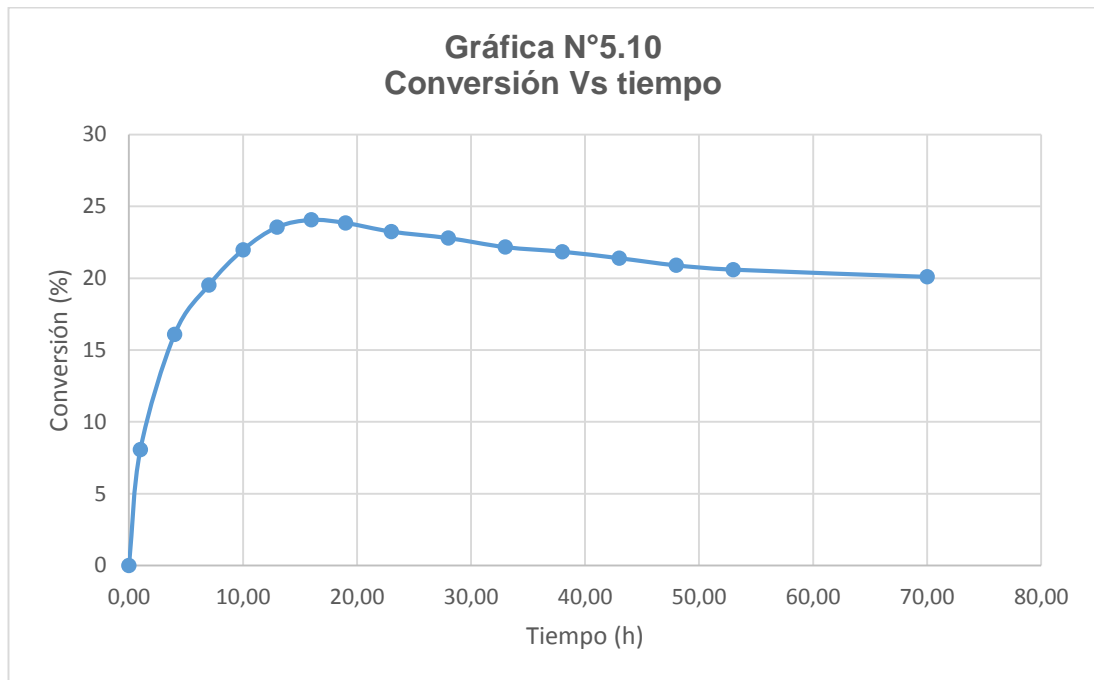
N°	Tiempo(h)	$[C_{HAC}]$	$[C_{H_2O_2}]$	$[C_{APA}]$	$[C_{H_2O}]$	Conversion (%)
1	0,00	8,90	8,90	0	16,80	0
2	1,00	8,18	8,18	0,72	17,52	8,08
3	4,00	7,46	7,46	1,43	18,23	16,1
4	7,00	7,16	7,16	1,74	18,54	19,52
5	10,00	6,94	6,94	1,96	18,75	21,98
6	13,00	6,80	6,80	2,10	18,90	23,56
7	16,00	6,76	6,76	2,14	18,94	24,06
8	19,00	6,78	6,78	2,12	18,92	23,85
9	23,00	6,83	6,83	2,07	18,87	23,25

10	28,00	6,87	6,87	2,03	18,83	22,8
11	33,00	6,92	6,92	1,97	18,77	22,17
12	38,00	6,95	6,95	1,94	18,74	21,85
13	43,00	6,99	6,99	1,90	18,70	21,4
14	48,00	7,04	7,04	1,86	18,66	20,9
15	53,00	7,06	7,06	1,83	18,63	20,6
16	70,00	7,11	7,11	1,79	18,59	20,1

Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia

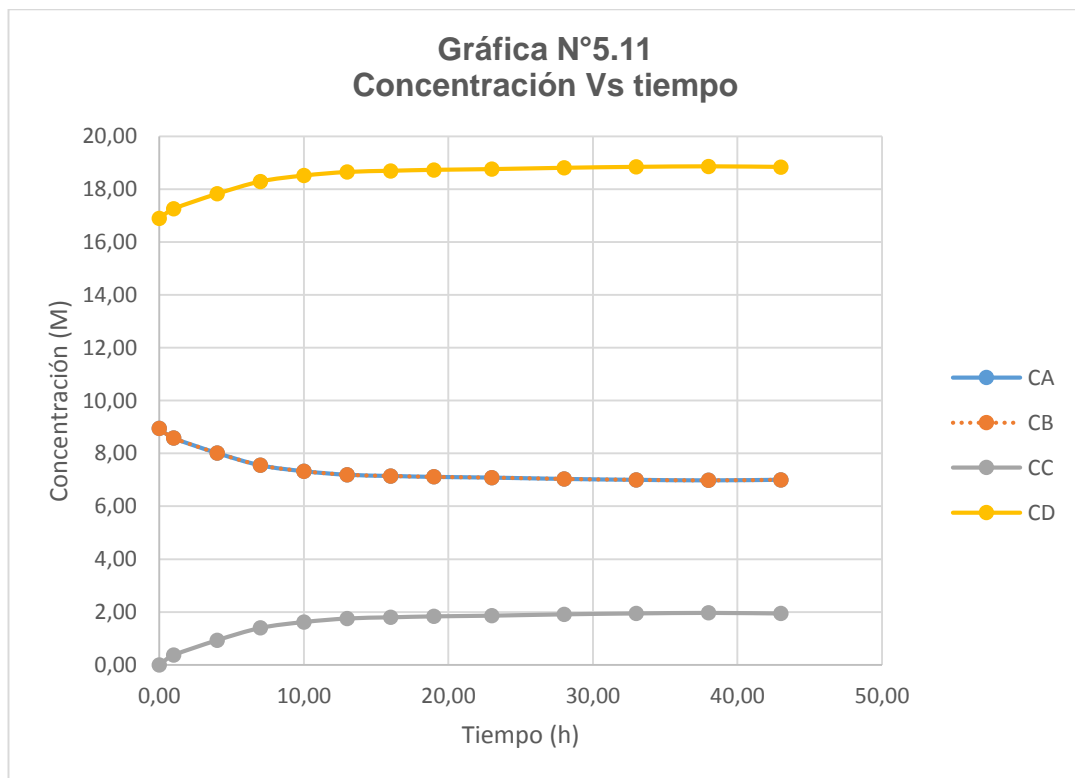
Tabla N° 5.7
Concentración Vs tiempo

Concentración Vs tiempo a las condiciones de operación
 $X_1 = 1/1$, $X_2 = 40\text{ }^\circ\text{C}$, $X_3 = 0,1\%$ Catalizador y $X_4 = 200\text{ rpm}$

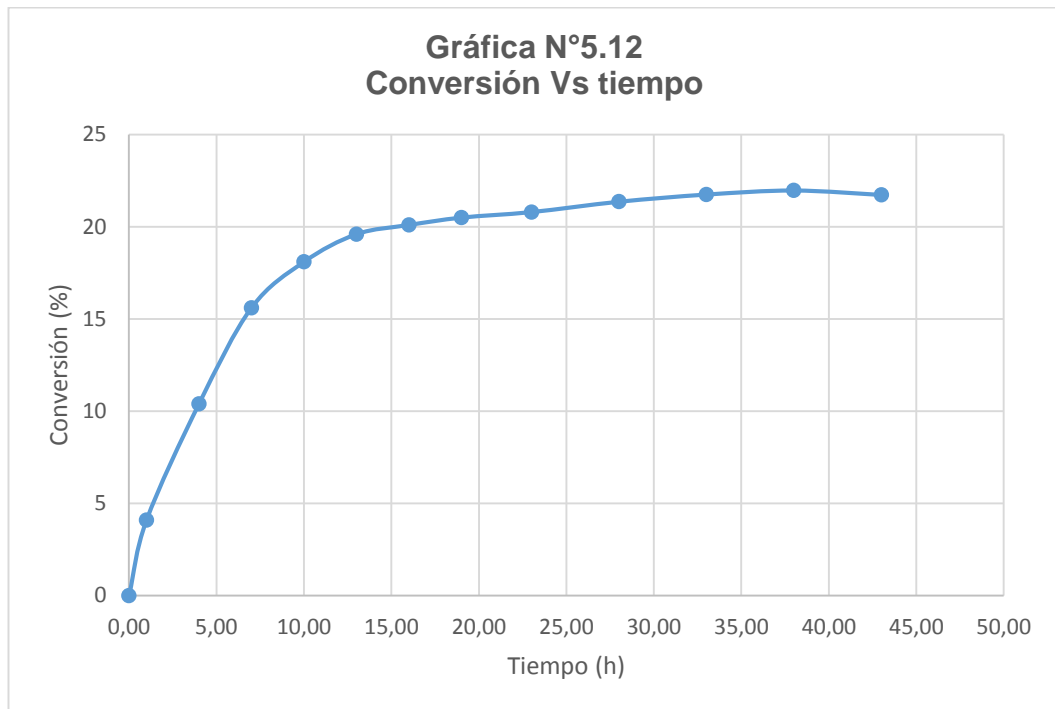
N°	Tiempo(h)	$[C_{HAC}]$	$[C_{H_2O_2}]$	$[C_{APA}]$	$[C_{H_2O}]$	Conversión (%)
1	0,00	8,95	8,95	0	16,90	0
2	1,00	8,58	8,58	0,37	17,26	4,09
3	4,00	8,02	8,02	0,93	17,83	10,4
4	7,00	7,55	7,55	1,40	18,29	15,61
5	10,00	7,33	7,33	1,62	18,52	18,1
6	13,00	7,20	7,20	1,75	18,65	19,6
7	16,00	7,15	7,15	1,80	18,70	20,1
8	19,00	7,11	7,11	1,83	18,73	20,5
9	23,00	7,09	7,09	1,86	18,76	20,8

10	28,00	7,04	7,04	1,91	18,81	21,36
11	33,00	7,00	7,00	1,95	18,84	21,75
12	38,00	6,98	6,98	1,97	18,86	21,97
13	43,00	7,00	7,00	1,94	18,84	21,73

Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia

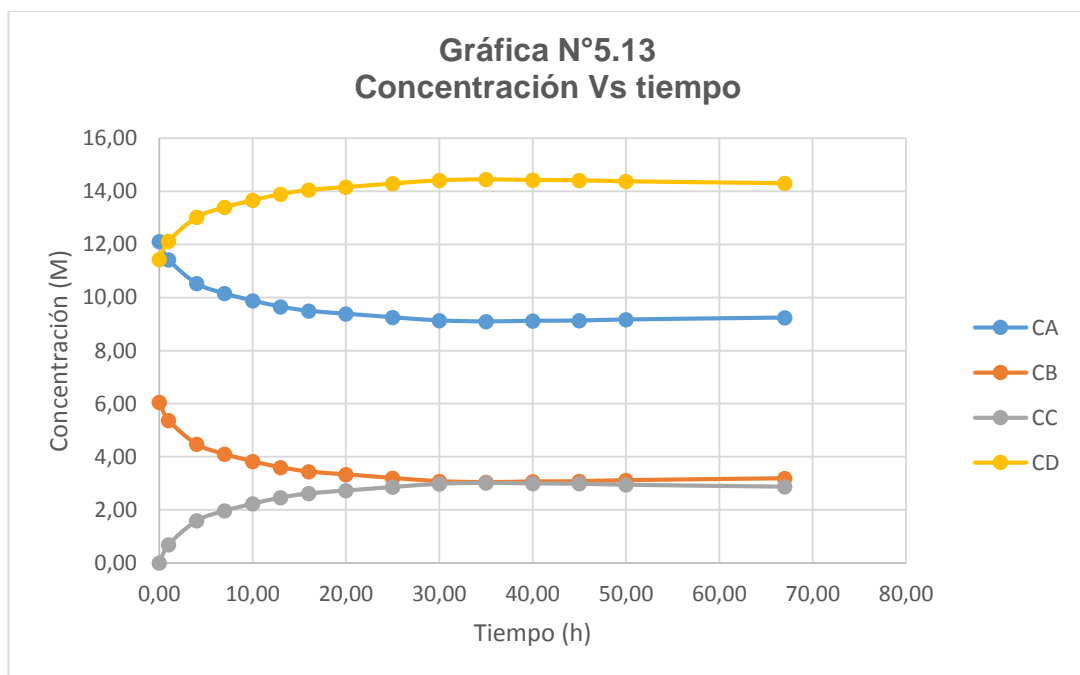
Tabla N° 5.8
Concentración Vs tiempo

Concentración Vs tiempo a las condiciones de operación
 $X_1 = 2/1$, $X_2 = 20\text{ °C}$, $X_3 = 1\%$ Catalizador y $X_4 = 200\text{ rpm}$

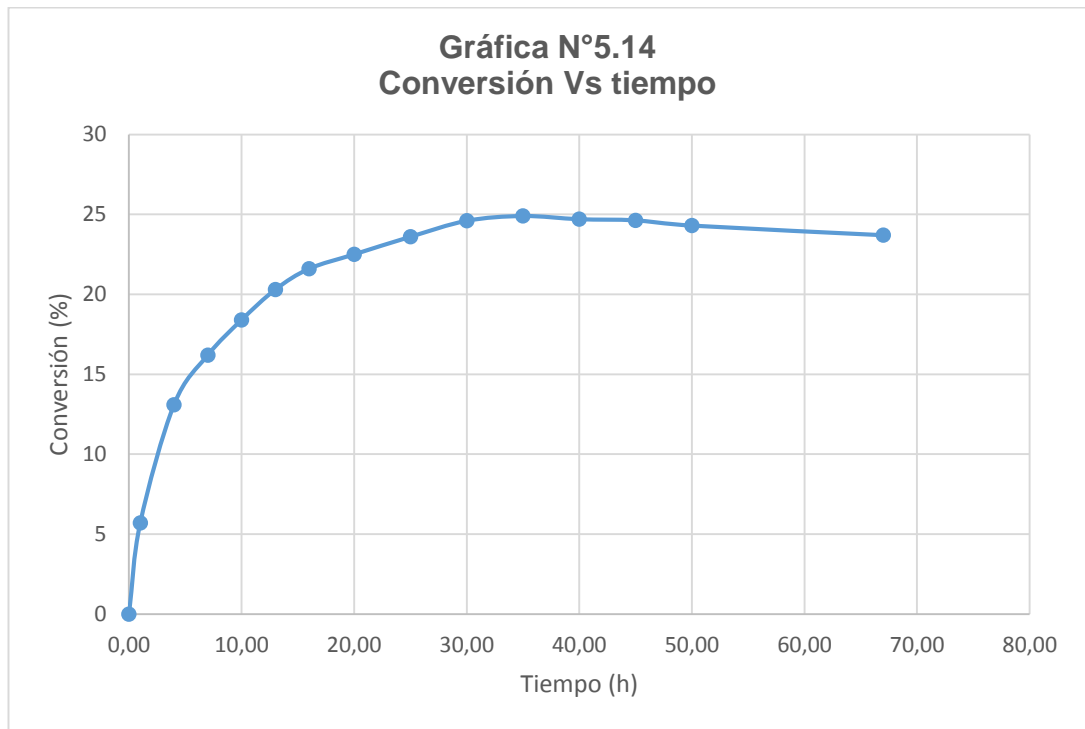
N°	Tiempo(h)	$[c_{HAC}]$	$[c_{H_2O_2}]$	$[c_{APA}]$	$[c_{H_2O}]$	Conversión (%)
1	0,00	12,11	6,05	0	11,43	0
2	1,00	11,42	5,36	0,69	12,12	5,7
3	4,00	10,52	4,47	1,59	13,02	13,1
4	7,00	10,15	4,09	1,96	13,39	16,2
5	10,00	9,88	3,83	2,23	13,66	18,4
6	13,00	9,65	3,60	2,46	13,89	20,3
7	16,00	9,49	3,44	2,62	14,05	21,6
8	20,00	9,39	3,33	2,72	14,16	22,5
9	25,00	9,25	3,20	2,86	14,29	23,6

10	30,00	9,13	3,08	2,98	14,41	24,6
11	35,00	9,09	3,04	3,02	14,45	24,9
12	40,00	9,12	3,06	2,99	14,42	24,7
13	45,00	9,13	3,07	2,98	14,42	24,63
14	50,00	9,17	3,11	2,94	14,38	24,3
15	67,00	9,24	3,18	2,87	14,30	23,7

Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia

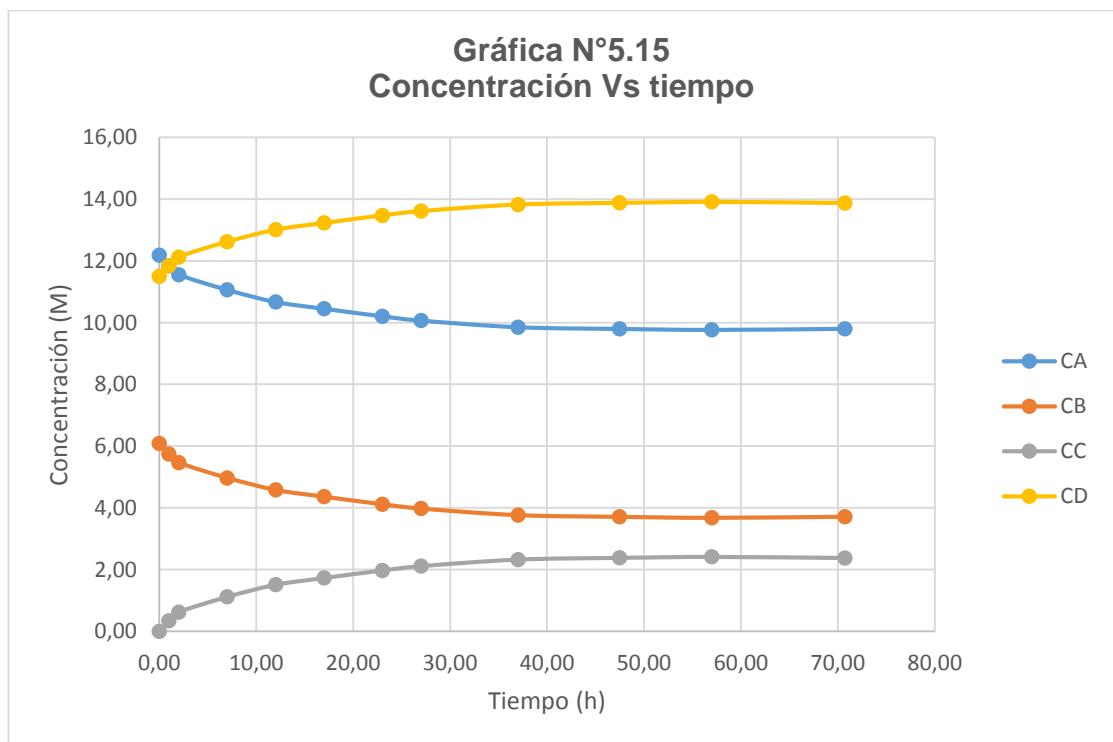
Tabla N° 5.9
Concentración Vs tiempo

Concentración Vs tiempo a las condiciones de operación
 $X_1 = 2/1$, $X_2 = 30\text{ °C}$, $X_3 = 0,1\%$ Catalizador y $X_4 = 300\text{ rpm}$

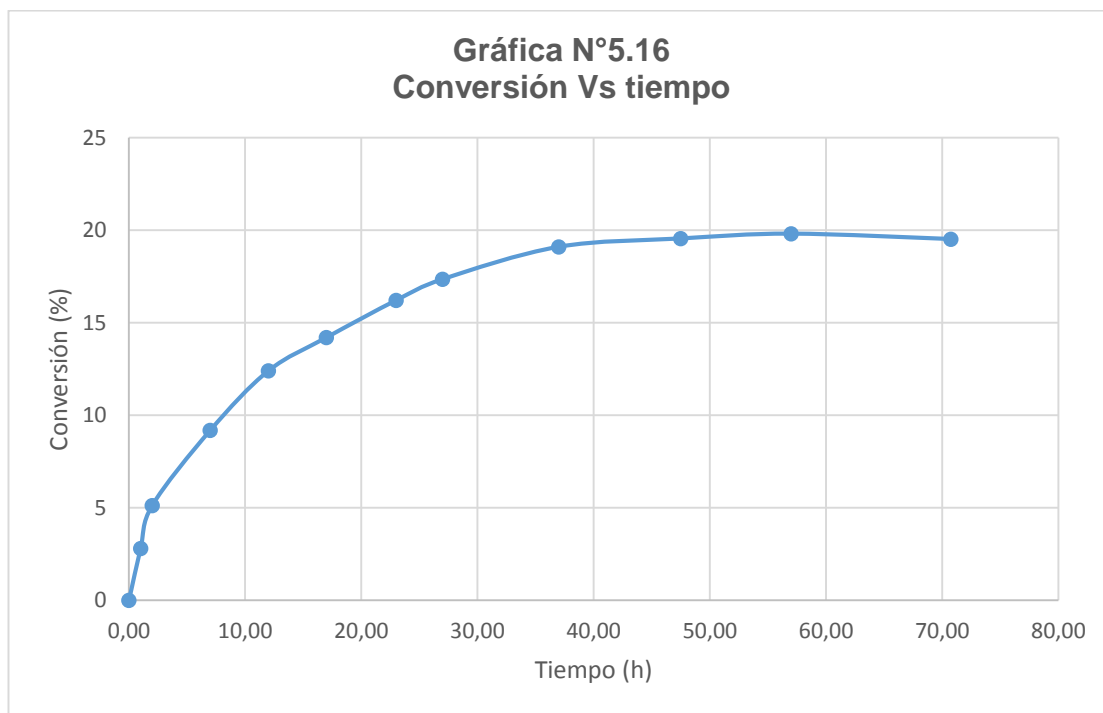
N°	Tiempo(h)	$[c_{HAC}]$	$[c_{H_2O_2}]$	$[c_{APA}]$	$[c_{H_2O}]$	Conversión (%)
1	0,00	12,18	6,09	0	11,50	0
2	1,00	11,84	5,75	0,34	11,84	2,8
3	2,00	11,56	5,47	0,62	12,12	5,13
4	7,00	11,06	4,97	1,12	12,62	9,19
5	12,00	10,67	4,58	1,51	13,01	12,4
6	17,00	10,45	4,36	1,73	13,23	14,2
7	23,00	10,21	4,12	1,97	13,47	16,21
8	27,00	10,07	3,98	2,11	13,61	17,35
9	37,00	9,85	3,76	2,33	13,83	19,1

10	47,50	9,80	3,71	2,38	13,88	19,55
11	57,00	9,77	3,68	2,41	13,91	19,81
12	70,75	9,80	3,71	2,38	13,88	19,52

Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia

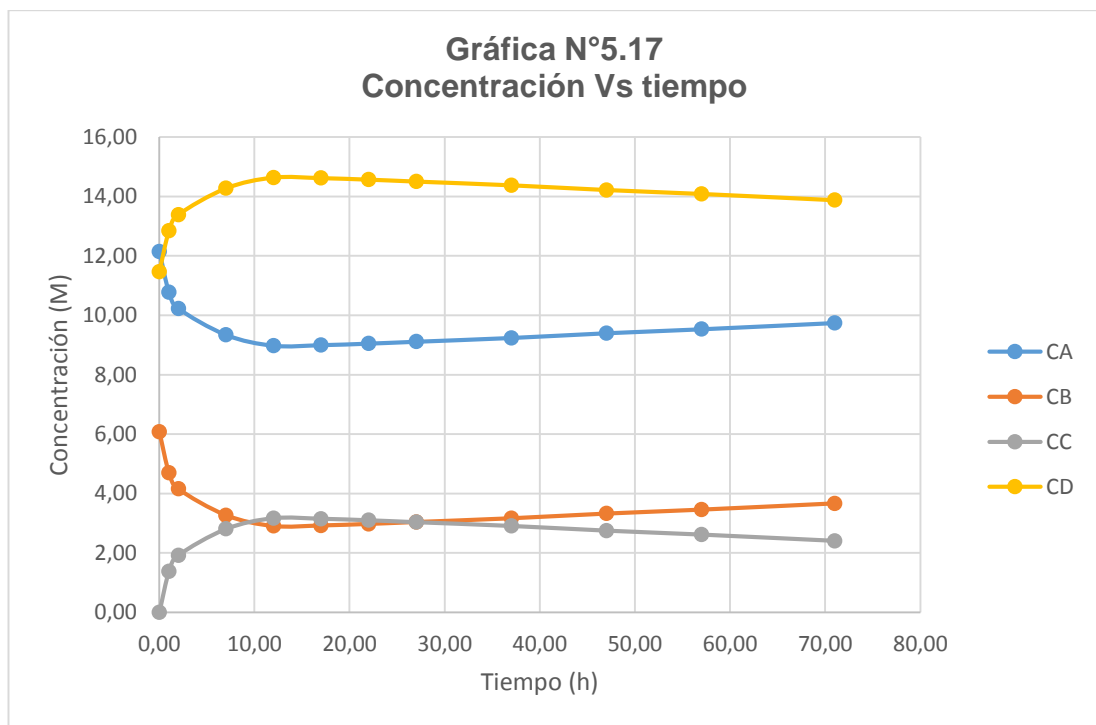
Tabla N° 5.10
Concentración Vs tiempo

Concentración Vs tiempo a las condiciones de operación
 $X_1 = 2/1$, $X_2 = 40\text{ }^\circ\text{C}$, $X_3 = 0,5\%$ Catalizador y $X_4 = 100\text{ rpm}$

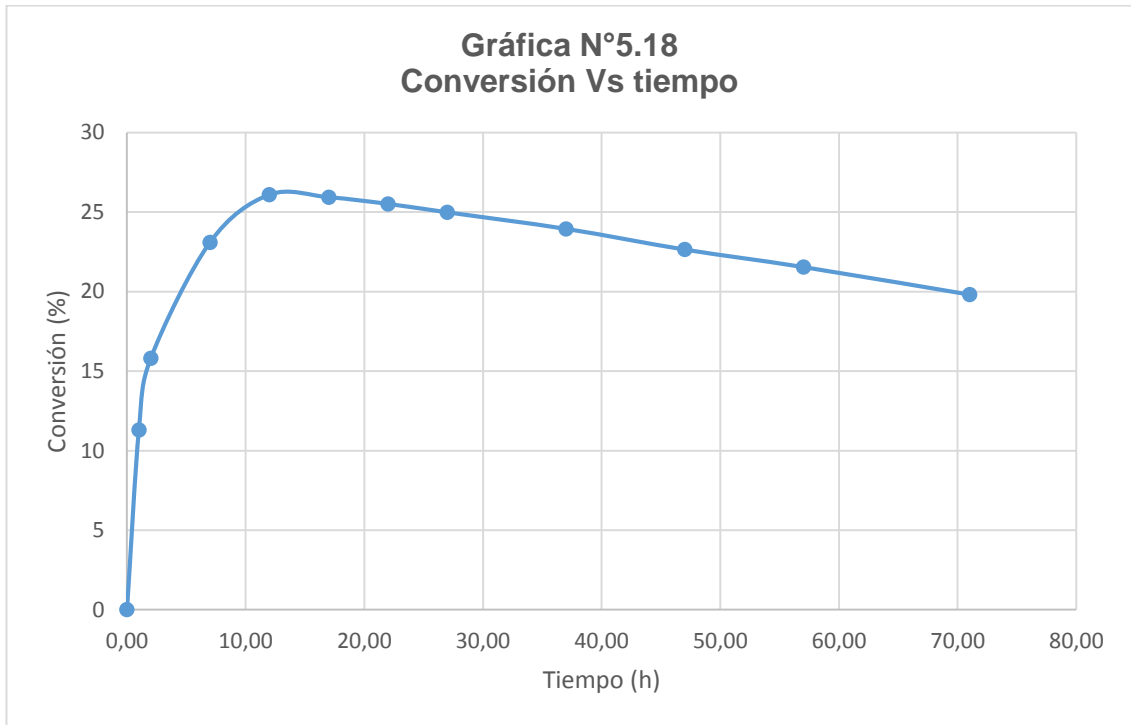
N°	Tiempo(h)	$[C_{HAC}]$	$[C_{H_2O_2}]$	$[C_{APA}]$	$[C_{H_2O}]$	Conversión (%)
1	0,00	12,15	6,07	0	11,47	0
2	1,00	10,78	4,70	1,37	12,84	11,3
3	2,00	10,23	4,15	1,92	13,39	15,8
4	7,00	9,34	3,27	2,81	14,28	23,1
5	12,00	8,98	2,90	3,17	14,64	26,09
6	17,00	9,00	2,92	3,15	14,62	25,93
7	22,00	9,05	2,98	3,10	14,57	25,51
8	27,00	9,11	3,04	3,03	14,50	24,98
9	37,00	9,24	3,17	2,91	14,38	23,94

10	47,00	9,40	3,32	2,75	14,22	22,64
11	57,00	9,53	3,46	2,62	14,09	21,54
12	71,00	9,74	3,67	2,41	13,88	19,81

Fuente : Elaboracion propia

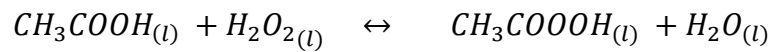


Fuente : Elaboracion propia



Fuente : Elaboracion propia

5.1 Determinación de la constante de equilibrio a partir de datos experimentales



$$K_{eq} = \frac{k_1}{k_2} = \frac{[CH_3COOOH][H_2O]}{[CH_3COOH][H_2O_2]}$$

Tabla N° 5.11

Constante de equilibrio experimental

Fuente : Elaboracion propia

5.2 Determinación de los Parámetros Cinéticos de la reacción de esterificación

Sea la reacción: $A + B \leftrightarrow C + D$

$C_{A0} = C_{B0}$ ó $C_{A0} \neq C_{B0}$ y $C_{C0} = 0 ; C_{D0} \neq 0$

Entonces:

$$\frac{C_{B0}}{C_{A0}} = \theta_B \quad y \quad \frac{C_{D0}}{C_{A0}} = \theta_D$$

Nº Experiencia	X1	X2	X3	X4	Constante de Equilibrio (K_{eq})
1	1:2	20	0,1	100	0,3975
2	1:2	30	0,5	200	0,4758
3	1:2	40	1	300	0,6631
4	1:1	20	0,5	300	0,7583
5	1:1	30	1	100	0,8881
6	1:1	40	0,1	200	0,7606
7	2:1	20	1	200	1,5760
8	2:1	30	0,1	300	0,9346
9	2:1	40	0,5	100	1,7790

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k_1 C_A C_B - k_2 C_C C_D$$

$$C_{A0} \cdot \frac{dX_A}{dt} = k_1 [C_{A0}(1 - X_A)C_{A0}(\theta_B - X_A)] - k_2 (C_{A0}X_A)C_{A0}(\theta_D + X_A)$$

Resolviendo la integral

$$\frac{q}{n} \cdot \ln\left(\frac{m + nx}{m}\right) - p \cdot \ln\left(\frac{X_{eq} - x}{X_{eq}}\right) = k_1 C_{A0} t$$

Para $C_{A0} \neq C_{B0}$ y $C_{A0} = C_{B0}$

$$q = \frac{X_{eq}(\theta_D + X_{eq})[\theta_B - X_{eq}(\theta_B + \theta_D + 1)]}{\theta_B\theta_D + 2\theta_B X_{eq} - X_{eq}^2(\theta_B + \theta_D + 1)}$$

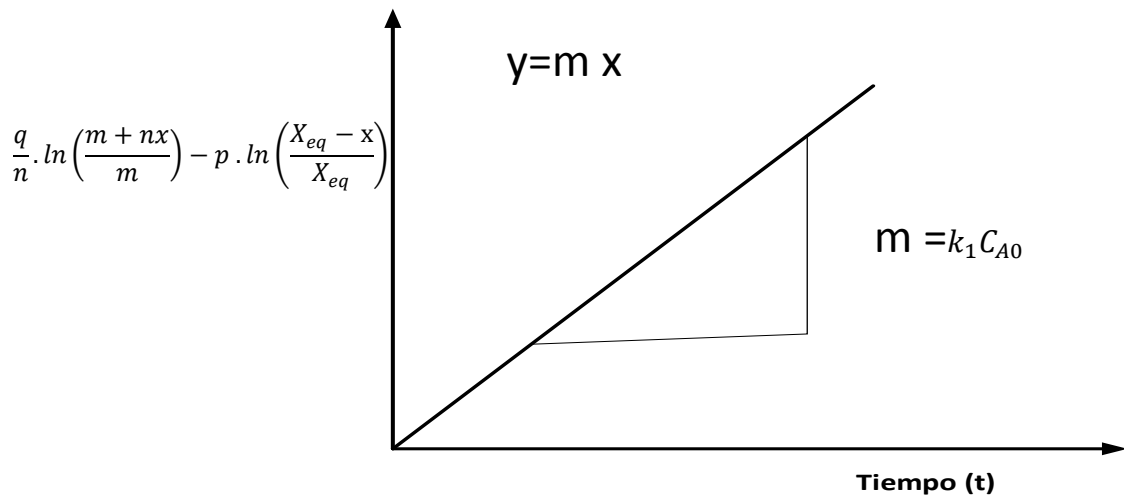
$$p = \frac{X_{eq}(\theta_D + X_{eq})}{\theta_B\theta_D + 2\theta_B X_{eq} - X_{eq}^2(\theta_B + \theta_D + 1)}$$

$$m = \theta_B\theta_D + \theta_B X_{eq}$$

$$n = \theta_B - X_{eq}(\theta_B + \theta_D + 1)$$

Figura N° 5.1

Reacción reversible de segundo orden



Fuente : Elaboracion propia

Caso I: Experiencia N°01

$$\frac{C_{B0}}{C_{A0}} = \theta_B = \frac{2}{1}$$

Peróxido de hidrogeno al 50 % w/w contiene 50% de agua

$$\frac{C_{D0}}{C_{A0}} = \theta_D = 3.774$$

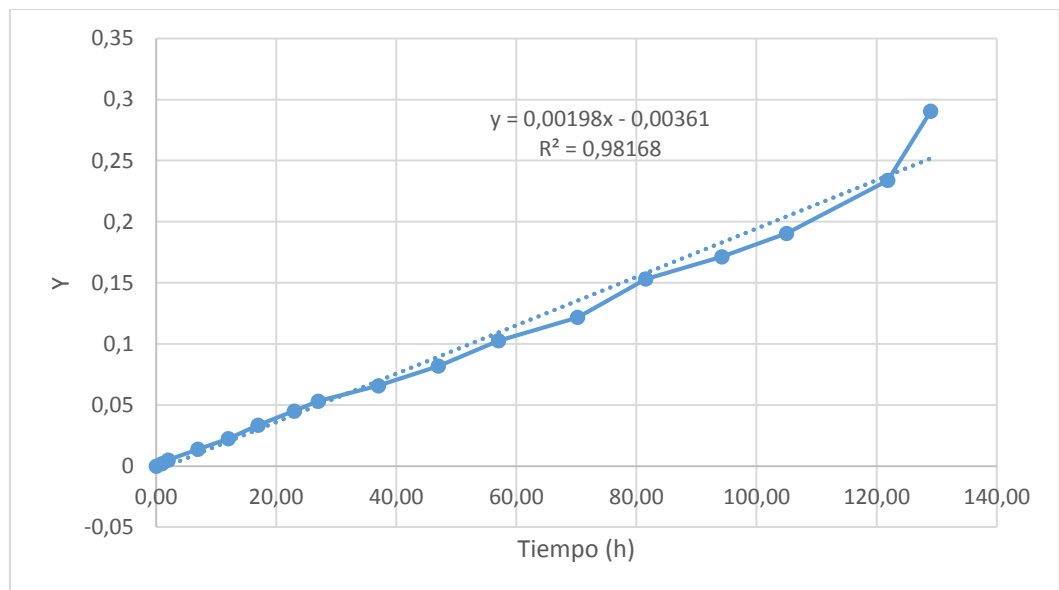
$$X_{eq} = 0,157$$

Desarrollando:

m=	7,8571
n=	0,9355
q=	0,0721
p=	0,0771

Gráfica N° 5.19

Reacción reversible de la Experiencia N°01



$$y = k_1 C_{A0} x$$

m=	0,00198
K1=	3,39E-04

Tabla N° 5.12

Constantes (k_1) de velocidad directa de las experiencias

N° Experiencia	X1	X2	X3	X4	k_1 (L/mol,h)
1	1:2	20	0,1	100	3,39E-04
2	1:2	30	0,5	200	2,80E-03
3	1:2	40	1	300	8,38E-03
4	1:1	20	0,5	300	1,33E-03
5	1:1	30	1	100	7,38E-03
6	1:1	40	0,1	200	3,15E-03
7	2:1	20	1	200	5,49E-03
8	2:1	30	0,1	300	2,83E-03
9	2:1	40	0,5	100	1,30E-02

Fuente : Elaboracion propia

Tabla N° 5.13
Constantes (k_1 , k_2) de velocidad a diferentes temperaturas

N°	Temperatura (°C)	Constante de Equilibrio (K_{eq})	k_1 (L/mol,h)	k_2 (L/mol,h)
1	20	0,3975	3,39E-04	8,52E-04
2	30	0,4758	2,80E-03	5,87E-03
3	40	0,6631	8,38E-03	1,26E-02
4	20	0,7583	1,33E-03	1,76E-03
5	30	0,8881	7,38E-03	8,31E-03
6	40	0,7606	3,15E-03	4,14E-03
7	20	1,576	5,49E-03	3,48E-03
8	30	0,9346	2,83E-03	3,03E-03
9	40	1,779	1,30E-02	7,30E-03

Fuente : Elaboracion propia

Tabla N° 5.14
Ecuaciones de velocidad de reacción

N°	X1	X2	X3	X4	k ₁ (L/mol,h)	k ₂ (L/mol,h)	-r _A
1	1:2	20	0,1	100	3,39E-04	8,52E-04	$3,39E - 04C_A C_B - 8,52E - 04C_C C_D$
2	1:2	30	0,5	200	2,80E-03	5,87E-03	$2,80E - 03C_A C_B - 5,87E - 03C_C C_D$
3	1:2	40	1	300	8,38E-03	1,26E-02	$8,38E - 03C_A C_B - 1,26E - 02C_C C_D$
4	1:1	20	0,5	300	1,33E-03	1,76E-03	$1,33E - 03C_A C_B - 1,76E - 03C_C C_D$
5	1:1	30	1	100	7,38E-03	8,31E-03	$7,38E - 03C_A C_B - 8,31E - 03C_C C_D$
6	1:1	40	0,1	200	3,15E-03	4,14E-03	$3,15E - 03C_A C_B - 4,14E - 03C_C C_D$
7	2:1	20	1	200	5,49E-03	3,48E-03	$5,49E - 03C_A C_B - 3,48E - 03C_C C_D$
8	2:1	20	0,1	100	2,83E-03	3,03E-03	$2,83E - 03C_A C_B - 3,03E - 03C_C C_D$
9	2:1	40	0,5	100	1,30E-02	7,30E-03	$1,30E - 02C_A C_B - 7,30E - 03C_C C_D$

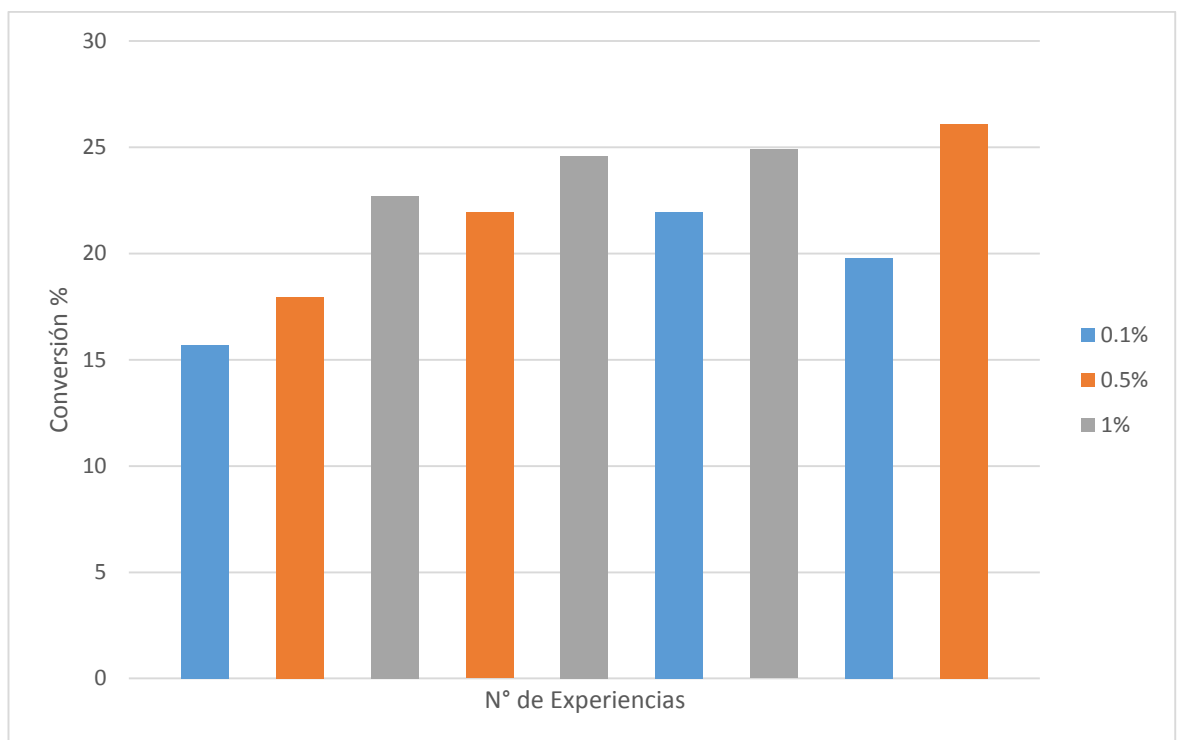
VI. DISCUSION DE RESULTADOS

6.1 Efecto de la concentración del catalizador en la reacción.

De la gráfica N° 6.1 se observa que cuando la concentración del catalizador (ácido sulfúrico) es de 1% tiene una tendencia mayor de conversión de ácido peracético comparado cuando se adiciona al 0,1%

Gráfico N° 6.1

Efecto de la concentración del catalizador en la conversión



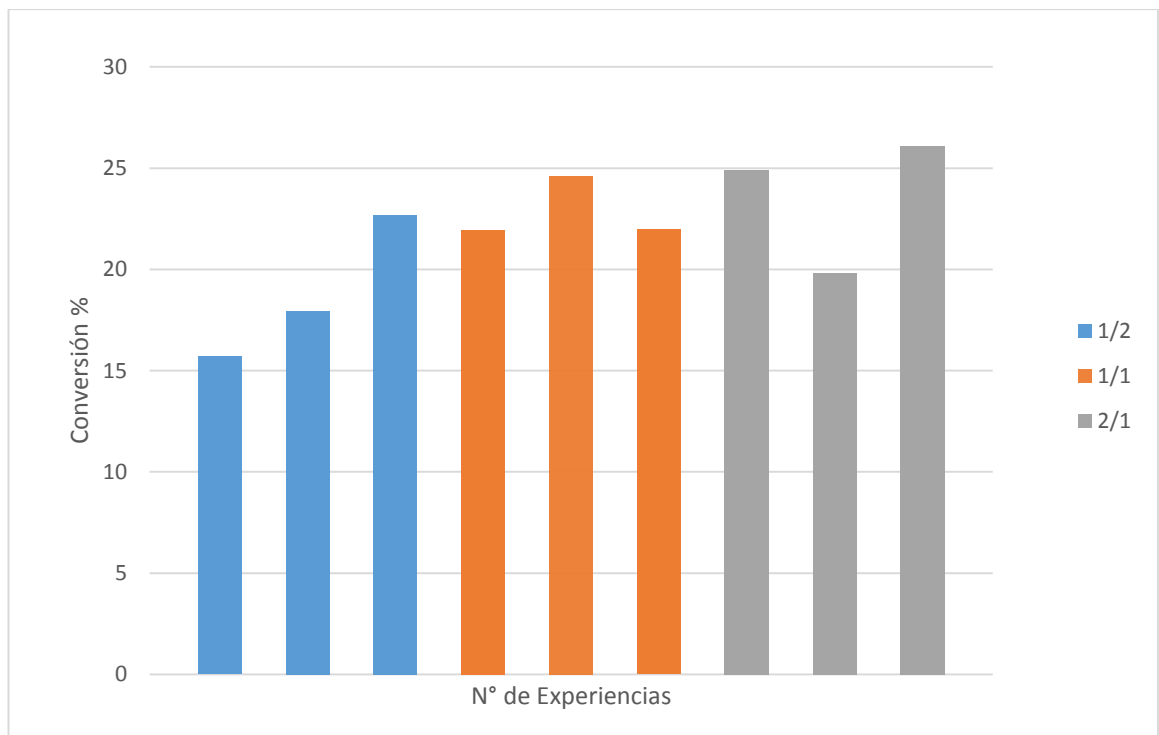
Fuente : Elaboracion propia

6.2 Efecto de la relación de concentración inicial reactantes

De la gráfica se observa cuando la relación molar de ácido acético y peróxido es de 2/1, se alcanza una mayor conversión de ácido peracético. El uso de exceso de peróxido no ayuda a la conversión del ácido.

Grafico N° 6.2

Efecto de la relación de reactantes en la conversión

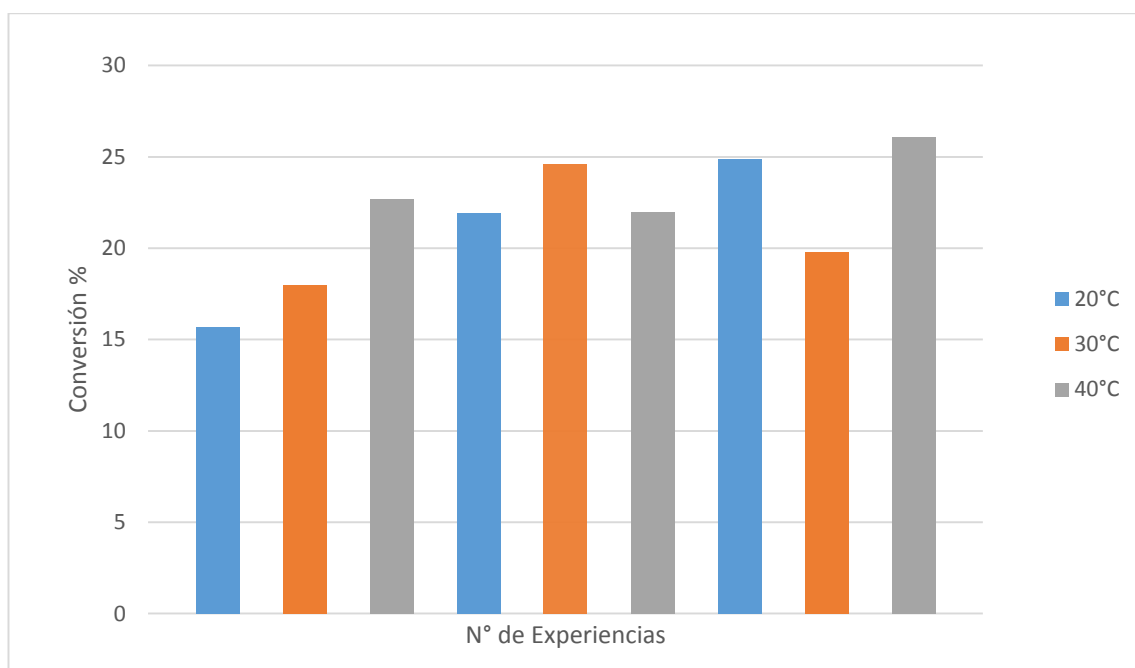


Fuente : Elaboracion propia

6.3 Efecto de la temperatura en la reacción.

De la gráfica se observa, que, al aumentar la temperatura de 20°C hasta 40°C aumenta ligeramente la conversión de ácido acético en la formación del producto como se indica en la gráfica N° 6.3

Grafico N° 6.3
Efecto de la temperatura en la conversión



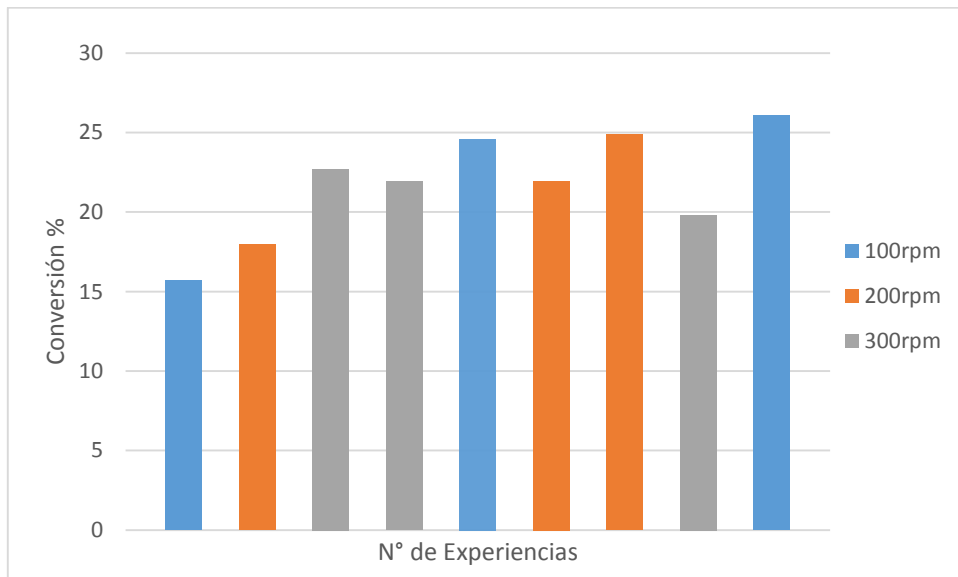
Fuente : Elaboracion propia

6.4 Efecto de la agitación de la mezcla de los reactantes

En el grafico N° 6.4 se observa que en la experiencia N° 09 hay una mayor conversión con 100 rpm, pero una menor en la experiencia N°01.

Gráfico N° 6.4

Efecto de la agitación de la mezcla de los reactantes en la conversión



Fuente : Elaboracion propia

VII. Conclusiones

1. Los resultados muestran, cuando los parámetros de operación del reactor opera a 40°C, relación molar del ácido acético con respecto al peróxido es de 2 a1, porcentaje en peso de catalizador es de 1% en peso y 100 RPM se obtiene mayor porcentaje de conversión del ácido acético y mayor concentración molar del ácido pera acético como se indica en la tabla N° 5.1
2. Las propiedades físico químicas del ácido pera acético obtenido en las pruebas experimentales, densidad 1,16 g/mL , pH = 1,6 , 15% en peso de ácido pera acético
3. mejores parámetros cinéticos obtenidos de la síntesis de ácido pera acéticos a la temperatura de 40°C , relación molar de 2 a1 y 100RPM y 0,5% de catalizador para la reacción directa es de : $k_1 = 1,3 \times 10^{-2} \frac{L}{mol h}$ y su expresión de velocidad es de $-r_A = 1,3 \times 10^{-2} C_A C_B - 7,3 \times 10^{-3} C_C C_D$

VIII. RECOMENDACIONES

1. Se recomienda efectuar la experimentación a mayor temperatura para ver la influencia con la conversión y la concentración de ácido peracético obtenido.
2. Investigar nuevas técnicas de análisis instrumental del ácido peracético, para su análisis y efectuar el seguimiento de la cinética química.
3. Investigar con nuevos tipos de catalizadores heterogéneos como son las resinas de intercambio iónico y su influencia con la conversión y la concentración de ácido peracético
4. Investigar nuevas formas de obtener ácido peracético, como proceso electroquímico que se produce in situ peróxido de hidrógeno.

IX. REFERENCIALES

1. F. Ebrahimi, E. Kolehmainen, A. Laari, H. Haario, D.Semenov, I.Turunen **Determinación de la cinética de síntesis de ácidos percarboxílicos en un microreactor por modelo matemático**
Departamento de tecnología química, matemática y física, Universidad de tecnología Lappeenranta, Finlandia, 5 de Setiembre de 2011
2. Sebastien Leveneur, DmitryYu. Murzin, Tapio Salmi, Jyri-PekkaMikkola, NarendraKumar, KariEranen, Lionel Estel **Síntesis de Ácido peroxipropiónico a partir de ácido propiónico y peróxido de hidrógeno sobre catalizadores heterogéneos**
Laboratorio de química industrial e Ingeniería de reacción, Centro de procesos químicos, AboAkademi, Bislopgatan, Finlandia
Laboratoire de Securite des Procedes Chimiques, INSA Rouen, Place Emile Blondel, Mont Saint-Aignan Cedex, France 20 de noviembre del 2008
3. Zhao Xue-bing, Zhang Ting, Zhou Yu-jie, Liu De-hua **Preparación de ácido peracético a partir de ácido acético y peróxido de hidrógeno: Experimentación y modelado**
Instituto de química aplicada, departamento de ingeniería química, Universidad Tsinghua, Beijing, China
Instituto de energía nuclear y de nueva tecnología, Universidad Tsinghua Beijing, China 30 de julio del 2007
4. Zhao Xue-bing, Zhang Ting, Zhou Yu-jie, Liu De-hua **Preparación de ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno Parte I: Cinética para la síntesis e hidrólisis de ácido peracético**

Instituto de química aplicada, departamento de ingeniería química,
Universidad Tsinghua, Beijing, China

Instituto de energía nuclear y de nueva tecnología, Universidad
Tsinghua Beijing, China 5 de marzo del 2007

5. Zhao Xue-bing, Cheng Keke, Hao Junbin , Liu De-hua
Preparación de ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno Parte II: Cinética para la descomposición espontánea de ácido peracético en la fase líquida Instituto de química aplicada, departamento de ingeniería química, Universidad Tsinghua, Beijing, China Instituto de energía nuclear y de nueva tecnología, Universidad Tsinghua Beijing, China 4 de junio del 2008.

6. P.D. Jolhe, B.A.Bhanvase, V.S. Patil, S.H. Sonawane
Síntesis sonoquímica de ácido peracético en un reactor micro-estructurado de flujo continuo Instituto Universidad de tecnología química, Universidad del Norte de Maharashtra, Jalgaon, India Departamento de Ingeniería química, Laxminarayan Instituto de tecnología, Rashtrasant Tukadoji Maharaj Nagpur University, Nagpur, India Departamento de Ingeniería química, Instituto Nacional de Tecnología, Warangal, India 10 de abril del 2015

7. Sebastien Leveneur, Johan Warna, Kari Eranen, Tapio Salmi
Tecnología ecológica de proceso para ácidos percarboxílicos: estimación de la cinética y parámetros de dispersión asistido por computadora. Laboratorio de química industrial e Ingeniería de reacción, Centro de procesos químicos, Abo Akademi, Bislopsgatan, Finlandia Laboratoire de Securite des Procedes Chimiques, INSA Rouen, Acenue de l'Universite, Saint Etienne du Rouvray, France 1 de diciembre del 2010

X. APENDICE

Resultados para: Minitab.MTW

Análisis de Taguchi: %Conver vs. X1; X2; X3; X4

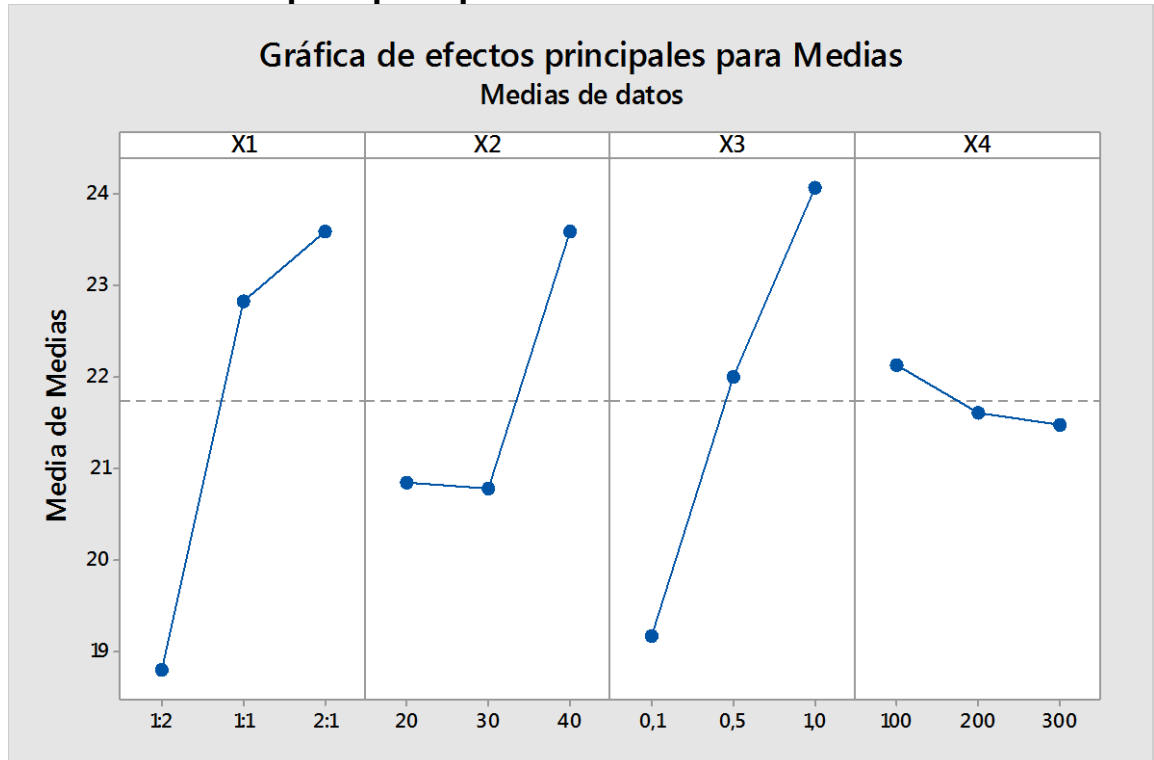
Tabla de respuesta para relaciones de señal a ruido
Más grande es mejor

Nivel	X1	X2	X3	X4
1	25.37	26.22	25.56	26.69
2	27.16	26.28	26.75	26.62
3	27.40	27.43	27.62	26.63
Delta	2.02	1.21	2.06	0.07
Clasificar	2	3	1	4

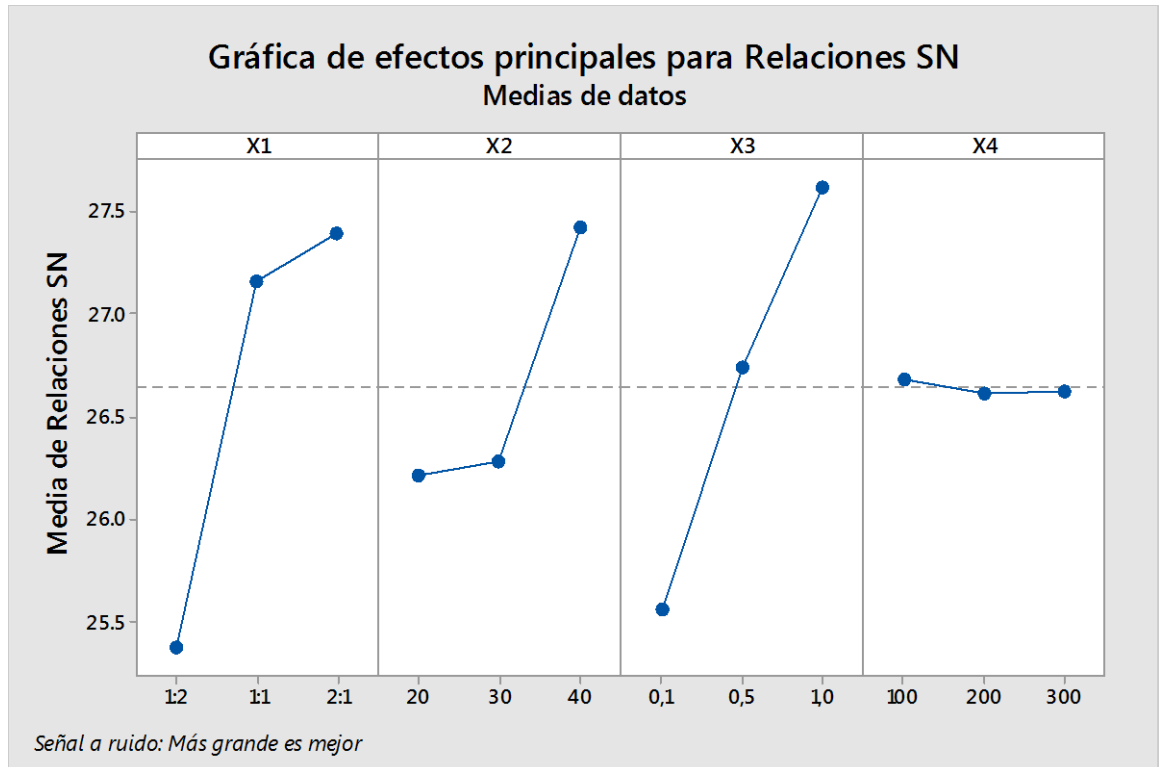
Tabla de respuesta para medias

Nivel	X1	X2	X3	X4
1	18.79	20.84	19.16	22.13
2	22.83	20.79	21.99	21.61
3	23.60	23.59	24.07	21.48
Delta	4.81	2.80	4.91	0.65
Clasificar	2	3	1	4

Gráfica de efectos principales para Medias



Gráfica de efectos principales para Relaciones SN



ANEXOS

A1: Matriz de consistencia

A.1 Matriz de consistencia

SÍNTESIS DE ÁCIDO PERACÉTICO A PARTIR DE PERÓXIDO DE HIDRÓGENO Y ÁCIDO ETANOICO CATALIZADO CON ÁCIDO SULFÚRICO EN UN REACTOR BATCH

PROBLEMA GENERAL	OBJETIVO GENERAL	HIPÓTESIS GENERAL	VARIABLE DEPENDIENTE	DIMENSIONES	INDICADORES	MÉTODO
¿Cuáles serán las características de la síntesis del ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido etanoico catalizada con ácido sulfúrico en un reactor batch?	Sintetizar ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido etanoico catalizada con ácido sulfúrico.	La síntesis de ácido peracético se llevará a cabo en condiciones que otorguen la máxima eficiencia de reacción.	X= Características de la síntesis de ácido peracético.	✓ Eficiencia de reacción en síntesis.	✓ %	✓ Ensayos en laboratorio: ✓ Colorimétrico.
SUB-PROBLEMA	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	HIPÓTESIS ESPECÍFICOS	VARIABLE INDEPENDIENTE	DIMENSIONES	INDICADORES	MÉTODO
A. ¿Cuáles son los parámetros de operación del reactor batch para alcanzar la mayor conversión de síntesis del ácido peracético?	A) Identificar los parámetros de operación del reactor batch para alcanzar mayor conversión en la síntesis de ácido peracético.	A) Las condiciones internas y externas que incrementan la eficiencia de reacción en el proceso de síntesis de ácido peracético son la temperatura y la concentración de catalizador.	Y2= Condiciones internas y externas que incrementan la eficiencia de reacción en el proceso de síntesis de ácido peracético.	✓ Relación molar ✓ Concentración (de reactantes) ✓ Temperatura. ✓ Concentración de catalizador.	✓ % ✓ °C ✓ %	✓ Controlador digital de termocupla. ✓ Ensayos en laboratorio: ✓ Volumétrico.
B. ¿Cuáles son las características fisicoquímicas del ácido peracético producido en el reactor batch?	B) Cuantificar las características fisicoquímicas del ácido peracético producido en el reactor batch.	B) Las características fisicoquímicas del ácido peracético son de medición directa.	Y3= Características fisicoquímicas del ácido peracético producido en el reactor batch	✓ Densidad ✓ Concentración de producto ✓ Concentración (de reactantes sin reaccionar)	✓ g/ml ✓ %	✓ Ensayos en laboratorio.
C) ¿Cuáles serán los parámetros cinéticos de la reacción de síntesis del ácido peracético?	D) Determinar los parámetros cinéticos (constante de velocidad, constante de equilibrio, orden de reacción) de la reacción de síntesis de ácido peracético.	C) El establecimiento de los parámetros cinéticos de reacción requiere de numerosas tomas de muestra.	Y4= Parámetros cinéticos de la reacción de síntesis del ácido peracético	✓ Constante de velocidad ✓ Constante de equilibrio ✓ Orden de reacción		✓ Ensayos en laboratorio. ✓ Cálculos y gráficas.