

**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO**  
**FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**  
**ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERIA QUIMICA**



**"EVALUACIÓN DE LAS VARIABLES DE OPERACIÓN DE UN REACTOR  
BATCH, EN LA SÍNTESIS DE ACETATO DE ISOPROPILO USANDO RESINA  
DE INTERCAMBIO IÓNICO COMO CATALIZADOR"**

TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE  
INGENIERO QUÍMICO

Jair Josué, Moloche Larrea

Jordan Alfonso, Espinoza Cueva

A handwritten signature in blue ink, appearing to be "Jair Josué Moloche Larrea".

**Callao, 2021**

**PERÚ**



## **PRÓLOGO DEL JURADO**

La presente tesis fue sustentada por los bachilleres **ESPINOZA CUEVA JORDAN ALFONSO** y **MOLOCHE LARREA JAIR JOSUÉ** ante el **JURADO DE SUSTENTACIÓN DE TESIS** conformado por los siguientes Profesores Ordinarios de la Universidad Nacional del Callao:

<b>Ing.Dr.. CARRASCO VENEGAS LUIS AMERICO</b>	<b>PRESIDENTE</b>
<b>Ing.Dr. CALDERON CRUZ JULIO CESAR</b>	<b>SECRETARIO</b>
<b>Lic.Mg. REYNA SEGURA ANA MARIA</b>	<b>VOCAL</b>
<b>Lic.Mg. ROJAS ROJAS VICTORIA ISABEL</b>	<b>SUPLENTE</b>
<b>Ing. Mg. MEDINA COLLANA JUAN TAUMATURGO</b>	<b>ASESOR</b>

Tal como está asentado en el **Libro de Actas N° 1** de Tesis con Ciclo de Tesis **Folio N° 80** y **Acta N° 79** de fecha **VEINTIDOS DE AGOSTO, DEL AÑO 2021**, para optar el Título Profesional de Ingeniero Químico en la Modalidad de Titulación de Tesis con Ciclo de Tesis, de conformidad establecido por el Reglamento de Grados y Títulos aprobado por Resolución de Consejo Universitario N° 245-2018-CU, del 30 de octubre del 2018.

## **DEDICATORIA**

La presente tesis está dedicada al forjador de nuestro camino quien nos ha dirigido por el sendero correcto, a Dios, y a nuestros padres porque ellos siempre estuvieron a nuestro lado brindándonos el apoyo y consejos necesarios para hacer de nosotros mejores personas. Así como también a todos los profesores que se involucraron en nuestra formación profesional.

# INDICE

	Pág.
TABLAS DE CONTENIDO .....	5
RESUMEN .....	10
ABSTRACT .....	11
INTRODUCCIÓN .....	12
<b>I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....</b>	<b>13</b>
1.1. Descripción de la realidad problemática .....	13
1.2. Formulación del problema .....	14
1.2.1. Problema general .....	14
1.2.2. Problemas específicos.....	14
1.3. Objetivos .....	14
1.3.1. Objetivo general.....	14
1.3.2. Objetivos específicos.....	14
1.4. Limitantes de la investigación.....	15
1.4.1. Limitantes teóricas.....	15
1.4.2. Limitantes espaciales .....	15
1.4.3. Limitantes temporales.....	15
<b>II. MARCO TEORICO .....</b>	<b>16</b>
2.1. Antecedentes de estudio .....	16
2.1.1. Antecedentes internacionales.....	16
2.1.2. Antecedentes nacionales.....	19
2.2. Bases teóricas.....	21
2.2.1. Reactor Batch .....	21

2.2.2. Acetato de isopropilo .....	22
2.2.3. Ácido acético .....	23
2.2.4. Isopropanol.....	24
2.2.5. Resina catalítica Lewatit S-1567.....	25
2.2.6. Esterificación .....	26
2.2.7. Cinética de la reacción .....	27
2.2.8. Catálisis homogénea y heterogénea .....	30
2.2.9. Resina de intercambio iónico.....	31
2.2.10. Modelos de reacción sobre resinas de intercambio catiónico .....	32
2.2.11. Diseños experimentos (DOE).....	34
2.2.12. Dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura .....	35
2.3. Conceptual .....	39
2.4. Definición de términos básicos .....	40
<b>III.HIPÓTESIS Y VARIABLES .....</b>	<b>41</b>
3.1 Hipótesis.....	41
3.1.1. Hipótesis general .....	41
3.1.2. Hipótesis específicas .....	42
3.2 Definición conceptual de variables .....	42
3.2.1. Operacionalización de las variables .....	42
<b>IV.DISEÑO METODOLÓGICO .....</b>	<b>44</b>
4.1 Tipo y diseño de la investigación.....	44
4.2 Metodología de la investigación .....	44
4.3 Población y muestra .....	48
4.4 Lugar de estudio y periodo desarrollado .....	48

4.5 Técnicas e instrumentos para la recolección de la información .....	48
4.5.1 Técnica de titulación .....	48
4.5.2 Determinación de los volúmenes de los reactivos.....	49
4.5.3 Evaluación de la cinética de esterificación .....	50
4.5.4 Técnica de análisis, métodos estadísticos.....	52
4.6 Análisis y procesamiento de datos .....	53
4.6.1 Muestra y tratamiento .....	53
4.6.2 Datos del desarrollo del trabajo de investigación.....	53
4.6.3 Análisis estadísticos .....	53
4.6.4 Identificación de variables y niveles.....	53
<b>V. RESULTADOS .....</b>	<b>56</b>
5.1 Resultados descriptivos.....	56
5.1.1 Desarrollo de corridas experimentales .....	56
5.1.2 Determinación de la ecuación cinética .....	74
5.1.3 Determinación de la energía de activación ( $E_a$ ).....	77
5.1.4 Determinación de la entropía, entalpía y energía de Gibbs.....	79
5.2 Resultados inferenciales .....	82
5.3 Otros resultados estadísticos .....	82
5.3.1 Efecto de la temperatura de reacción .....	83
5.3.2 Efecto %w/w del catalizador .....	83
5.3.3 Efecto de la velocidad de agitación en la reacción .....	84
5.3.4 Efecto de la relación de ácido y base en la reacción .....	85
<b>VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS .....</b>	<b>87</b>
6.1 Contratación y demostración de la hipótesis con los resultados .....	87
6.2 Contratación de los resultados con otros estudios similares. ....	97

6.3 Responsabilidad ética de acuerdo con los reglamentos vigentes .....	103
<b>VII.CONCLUSIONES.....</b>	<b>104</b>
<b>VIII.RECOMENDACIONES.....</b>	<b>105</b>
<b>IX.REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>106</b>
ANEXOS .....	109



# TABLAS DE CONTENIDO

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1</b> Propiedades físicas y químicas del acetato de isopropilo.....	23
<b>Tabla 2</b> Propiedades físicas y químicas del ácido acético .....	24
<b>Tabla 3</b> Propiedades físicas y químicas del isopropanol .....	25
<b>Tabla 4</b> Arreglo octogonal “L9” de Taguchi .....	35
<b>Tabla 5</b> Entalpía, energía de Gibbs y entropía .....	38
<b>Tabla 6</b> Distribución de volúmenes del sistema .....	50
<b>Tabla 7</b> Variables independientes y niveles de experimentación.....	54
<b>Tabla 8</b> Cuadro detallado de experiencias.....	55
<b>Tabla 9</b> Experiencia 1: Resultados experimentales .....	56
<b>Tabla 10</b> Experiencia 2: Resultados experimentales .....	58
<b>Tabla 11</b> Experiencia 3: Resultados experimentales .....	60
<b>Tabla 12</b> Experiencia 4: Resultados experimentales .....	62
<b>Tabla 13</b> Experiencia 5: Resultados experimentales .....	64
<b>Tabla 14</b> Experiencia 6: Resultados experimentales .....	66
<b>Tabla 15</b> Experiencia 7: Resultados experimentales .....	68
<b>Tabla 16</b> Experiencia 8: Resultados experimentales .....	70
<b>Tabla 17</b> Experiencia 9: Resultados experimentales .....	72
<b>Tabla 18</b> Datos experimentales para hallar la constante de velocidad .....	74
<b>Tabla 19</b> Valores determinados de la regresión lineal simple .....	75

<b>Tabla 20</b> Valores de la constante cinetica ( $k_1$ ) obtenidos a partir de las experiencias más óptimas.....	76
<b>Tabla 21</b> Valores de la constante cinética ( $k_2$ ) más óptimos .....	76
<b>Tabla 22</b> Expresión cinética de las experiencias más representativas. ....	77
<b>Tabla 23</b> Valores de la constante de equilibrio en función a la temperatura	81
<b>Tabla 24</b> Datos experimentales a nivel de laboratorio .....	82
<b>Tabla 25</b> Los estadísticos descriptivos .....	87
<b>Tabla 26</b> Información del factor Resumen de Modelo .....	88
<b>Tabla 27</b> Resumen de Modelo de regresión .....	88
<b>Tabla 28</b> Coeficientes de regresión .....	89
<b>Tabla 29</b> Ecuación de regresión .....	90
<b>Tabla 30</b> Correlación de Pearson entre parámetros de operación.....	91
<b>Tabla 31</b> Resultados para medias .....	93
<b>Tabla 32</b> Análisis de varianza de medias.....	93
<b>Tabla 33</b> Resumen de resultados del estudio de la energía de activación	102

## INDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1</b> Sistema de un reactor Batch con reactivos “A” y “B” .....	22
<b>Figura 2</b> Estructura de una resina de intercambio iónico Lewatit S-1567.....	32
<b>Figura 3</b> Dependencia de la constante de equilibrio ( $k_{eq}$ ) respecto a la temperatura (T) para una reacción exotérmica.....	36
<b>Figura 4</b> Dependencia de la constante de equilibrio ( $k_{eq}$ ) respecto a la temperatura (T) para una reacción endotérmica.....	36
<b>Figura 5</b> Dependencia lineal de la constante de equilibrio ( $\ln(k_{eq})$ ) respecto a la temperatura ( $1/T$ ) .....	38
<b>Figura 6</b> Esquema de las etapas del proceso .....	46
<b>Figura 7</b> Equipo para la reacción de esterificación.....	47
<b>Figura 8</b> Arreglo del diseño de Taguchi para 3 niveles y 4 factores .....	54
<b>Figura 9</b> Experiencia 1. Concentraciones(mol/L) vs Tiempo(min) .....	57
<b>Figura 10</b> Experiencia 1. Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min) .....	57
<b>Figura 11</b> Experiencia 2. Concentraciones(mol/L) vs Tiempo (min) .....	59
<b>Figura 12</b> Experiencia 2. Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min) .....	59
<b>Figura 13</b> Experiencia 3. Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min) .....	61
<b>Figura 14</b> Experiencia 3. Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min) .....	61
<b>Figura 15</b> Experiencia 4. Concentraciones(mol/L) vs Tiempo (min) .....	63
<b>Figura 16</b> Experiencia 4. Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min) .....	63
<b>Figura 17</b> Experiencia 5. Concentraciones(mol/L) vs Tiempo (min) .....	65
<b>Figura 18</b> Experiencia 5. Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min) .....	65

<b>Figura 19</b>	Experiencia 6. Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min) .....	67
<b>Figura 20</b>	Experiencia 6. Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min) .....	67
<b>Figura 21</b>	Experiencia 7. Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min) .....	69
<b>Figura 22</b>	Experiencia 7. Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min) .....	69
<b>Figura 23</b>	Experiencia 8. Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min) .....	71
<b>Figura 24</b>	Experiencia 8. Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min) .....	71
<b>Figura 25</b>	Experiencia 9. Concentraciones(mol/L) vs Tiempo (min) .....	73
<b>Figura 26</b>	Experiencia 9. Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min) .....	73
<b>Figura 27</b>	Datos experimentales para hallar las constantes de velocidad...	75
<b>Figura 28</b>	Regresión lineal de constante ( $\ln k_1$ ) vs temperatura ( $1/T$ ).....	77
<b>Figura 29</b>	Constante de equilibrio en función a la temperatura .....	81
<b>Figura 30</b>	Efecto de temperatura vs grado de conversión .....	83
<b>Figura 31</b>	Efecto %w/w del catalizador.....	84
<b>Figura 32</b>	Efecto de la velocidad de agitación (RPM).....	85
<b>Figura 33</b>	Relación molar [A] vs $X_A$ .....	86
<b>Figura 34</b>	Normalidad del Residuo de la Media de $X_A$ .....	87
<b>Figura 35</b>	Interacción entre el grado de conversión $X_A$ .....	92
<b>Figura 36</b>	Efecto principal del grado de conversión $X_A$ .....	94
<b>Figura 37</b>	Efecto de las medias de la relación molar vs conversión.....	95
<b>Figura 38</b>	Efecto de las medias del catalizador vs conversión.....	95
<b>Figura 39</b>	Efecto de las medias de temperatura vs conversión.....	96
<b>Figura 40</b>	Efecto de las medias de agitación vs conversión.....	96

<b>Figura 41</b>	Variación de la constante de equilibrio con la temperatura.....	98
<b>Figura 42</b>	Variación del comportamiento de la constante de equilibrio .....	98
<b>Figura 43</b>	Conversión en reacción para operación con y sin catalizador ....	99
<b>Figura 44</b>	Conversión en reacción con catalizador Lewatit S-1567 .....	100
<b>Figura 45</b>	Determinación de la energía de activación para Etanol-Ácido..	101
<b>Figura 46</b>	Determinación de la energía de activación para la esterificación del PET.....	102

## RESUMEN

En el presente trabajo de investigación se evaluó las variables de un sistema de reactor batch en la síntesis del acetato de isopropilo con el fin de encontrar las condiciones adecuadas en las que se puede elaborar este producto. Para lograrlo se llevó a cabo un estudio realizando corridas experimentales distribuidas según el modelo de Taguchi y utilizando el método de titulación ácido/base para la determinación de las variables como la relación de concentraciones de ácido acético  $[H^+]$  y alcohol isopropílico  $[OH^-]$ , la influencia de la temperatura ( $^{\circ}C$ ), la velocidad de agitación (RPM) del reactor, la concentración del catalizador (w/w%) y el grado de conversión ( $X_a$ ), así mismo se realizó el tratamiento de datos mediante métodos estadísticos utilizando el software Minitab. Los resultados obtenidos indican una conversión de 49.5% bajo las condiciones de ( $T= 60^{\circ}C$ , 400 RPM, 1.5w/w% y  $[H^+]=[OH^-]=1M$ ). Se concluye que el proceso es viable debido a su bajo costo de reactivos y su alto grado de conversión cercano al 50% y a las condiciones indicadas.

**Palabras claves:** Reactor Batch catalítico, síntesis de acetato de isopropilo, resina de intercambio iónico.

## ABSTRACT

In the present research work, the variables of a batch reactor system in the synthesis of isopropyl acetate were evaluated to find the appropriate conditions in which this product can be elaborated. To achieve this, a study was carried out carrying out distributed experimental runs according to the Taguchi model and using the acid / base titration method to determine variables such as the relation of acetic acid  $[H^+]$  and isopropyl alcohol  $[OH^-]$  concentrations, the influence of the temperature ( $^{\circ}C$ ), the stirring speed (RPM) of the reactor, the concentration of the catalyst (w/w%) and the degree of conversion ( $X_A$ ), likewise the data treatment was carried out by statistical methods using the Minitab software. The results obtained indicate a conversion of 49.5% under the conditions of ( $T = 60^{\circ}C$ , 400 RPM, 1.5w/w% and  $[H^+] = [OH^-] = 1M$ ). It is concluded that the process is viable due to its low cost of reagents and its high degree of conversion close to 50% at the indicated conditions.

**Keywords:** Reactor Batch, catalyst, isopropyl acetate synthesis, Ionic resin.

## INTRODUCCIÓN

Las empresas del sector orgánico como: pinturas, resinas, grasas, aceites, tintes de impresión, entre otras, cada vez están tratando de elaborar productos innovadores y mejorar sus procesos con el fin de generar mayor ingreso económico y disminuir el impacto ambiental. Por este motivo la síntesis de ésteres es una opción viable para ser utilizados como solventes efectivos en la dilución o remoción de muchas sustancias contaminantes que se presentan en las industrias.

La síntesis de ésteres hoy en día es un proceso que está siendo investigado relevantemente por la industria química, obteniéndose productos muy útiles como aditivos industriales. Así mismo tratamos de realizar algunas mejoras al proceso tradicional de esterificación, con el objetivo de crear un producto con alta conversión que sea económicamente viable analizando el comportamiento de las diferentes variables de operación en la reacción.

Para el efecto se utiliza un reactor batch que opera en un sistema pseudo-homogéneo, utilizando reactivos en estado líquido y un catalizador en estado sólido que reduzca el impacto ambiental y mejora la eficiencia en cuanto al uso de insumos y los costos de operación de la empresa. El experimento fue realizado a nivel de laboratorio utilizando un balón de vidrio con tres entradas (reactor batch) de capacidad de 1L a distintas condiciones de operación, destacando que los resultados obtenidos en el trabajo de investigación buscan incentivar que las empresas realicen procesos de esterificación en sistemas pseudo-homogéneos con el fin de mermar las operaciones de separación de reactivos, los cuales si son requeridos en sistemas completamente homogéneos.



# I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

## 1.1. Descripción de la realidad problemática

El acetato de isopropilo resulta ser un producto intermedio importante para la industria farmacéutica, es comercializado como solvente de pinturas, barnices y tintas de impresión, también puede usarse como sustituto del acetato de etilo, sin embargo este producto puede obtenerse por el método convencional mediante una reacción de esterificación utilizando un catalizador homogéneo, pero esta tecnología ha sido suspendida por el alto consumo de energía y catalizador que emplean las industrias para la síntesis del éster. Es por ello, este trabajo propone utilizar un catalizador heterogéneo reutilizable como es el caso de las resinas de intercambio iónico.

Es por ello por lo que en los últimos años se ha percibido un notable crecimiento en la demanda de publicaciones de procesos integrados (reacción y separación simultánea), además de conseguir incrementar el rendimiento en comparación con los procesos tradicionales, reduce el requerimiento de energía, así como también la inversión económica. (Piemonte y Basile, 2013)

Una de las principales ventajas de los procesos realizados en combinación de un reactor batch con un separador de volátil es la eliminación de equipos para la recuperación de productos y para la recirculación de reactivos no convertidos. (Marulanda, 2002)

Entre los productos que se puede obtener mediante este proceso, se encuentra el acetato de isopropilo (IPAc) que si bien es un producto muy difícil de obtener comparado con el acetato de butilo y el acetato de etilo por el método convencional

(utilizando un catalizador homogéneo), por lo que este trabajo ofrece un método eco-amigable para la obtención de distintos tipos de ésteres. (Wei y Malone, 2011).

## **1.2. Formulación del problema**

### **1.2.1. Problema general**

¿Cómo se evaluarán las variables de operación de un reactor batch, en la síntesis de acetato de isopropilo usando la resina de intercambio iónico como catalizador?

### **1.2.2. Problemas específicos**

- a) ¿Cuál será la expresión cinética de síntesis de acetato de isopropilo?
- b) ¿Cómo será el desempeño del catalizador en la reacción de esterificación?
- c) ¿Cuáles será la temperatura y velocidad de agitación adecuada para alcanzar mayor conversión?

## **1.3. Objetivos**

### **1.3.1. Objetivo general**

Evaluar las variables de operación mediante un reactor batch en la síntesis del acetato de isopropilo, usando la resina de intercambio iónico Lewatit como catalizador.

### **1.3.2. Objetivos específicos**

- a) Determinar la expresión cinética de síntesis de acetato de isopropilo.
- b) Determinar el desempeño del catalizador en la reacción de esterificación con cada ensayo.
- c) Determinar la temperatura y velocidad de agitación más adecuada para alcanzar la mayor conversión.

## **1.4. Limitantes de la investigación**

### **1.4.1. Limitantes teóricas**

Para el presente trabajo de investigación se tuvo que profundizar y recurrir a diferentes fuentes de información con el fin de poder tener la mayor claridad del proceso de obtención de los ésteres, debido a que la información que se tenía actualmente no era tan consistente, esto implicó que consultáramos posteriormente con algunos asesores referentes al estudio.

### **1.4.2. Limitantes espaciales**

Nuestro trabajo se desarrolló en el Laboratorio de Procesos Unitarios (LOPU) en la Universidad Nacional del Callao, sin embargo, era necesario generar algunos permisos especiales para poder utilizar el espacio requerido.

### **1.4.3. Limitantes temporales**

Una de las principales barreras que se tuvo fue el tiempo para poder desarrollar las corridas experimentales, ya que era necesario realizar esta actividad de manera presencial, así mismo se tuvo que planificar y organizar los tiempos mediante un cronograma de actividades, el cual nos pudo facilitar el desarrollo de la tesis antes de la pandemia.

## II. MARCO TEORICO

### 2.1. Antecedentes de estudio

#### 2.1.1. Antecedentes internacionales

**Rivera et al. (2017)** nos dan a conocer en su artículo publicado "*Prototipo desarrollado en los laboratorios para obtención de acetato de etilo en un solo equipo*". Los autores evaluaron la efectividad del proceso de obtención del acetato de etilo a nivel de laboratorio mediante la destilación reactiva, estos diseñaron una pequeña planta piloto simulado el proceso de destilación reactiva para la obtención del éster, obteniendo como resultado un grado de conversión mayor al 50%, concluyendo que la eficiencia de este proceso de separación por su aplicación a nivel industrial tiene grandes ventajas.

**Londoño (2015)** en su trabajo de tesis el cual se detalla el "*Estudio cinético de la esterificación del ácido acético con metanol sobre Amberlyte 15 en un micro reactor*". Este estudio se basó en la determinación de la ecuación cinética del proceso para la obtención de acetato de metilo, Londoño utilizó técnicas de micro fabricación para la elaboración de un micro reactor tubular que permita estudiar la cinética de esterificación del ácido acético empleando una resina de intercambio catiónico Amberlyte 15. Para este estudio utilizó un micro reactor tubular PBR empacado con la resina de intercambio catiónico Amberlyte 15, teniendo como tolerancias entre (303,15K – 333,15K) y relaciones molares de metanol respecto al ácido acético en el flujo de alimentación de 1,2 y 3, la masa del catalizador permaneció fija, concluyendo que con estos parámetros se puede obtener una adecuada ecuación cinética.

**Wei y Malone (2011)** en su artículo de investigación "*Semibatch reactive distillation for isopropyl acetate synthesis*". Los autores usaron el método de destilación reactiva por lotes (BRD), teniendo como objetivo comparar las características de vapor-líquido y líquido-líquido de tres sistemas de éster de acetato (butilo, amilo e isopropilo) y el método de destilación reactiva semicontinua (SBRD) para la obtención del acetato de isopropilo, ya que con el método de BRD fue complicado lograrlo, debido a la naturaleza del equilibrio de fase. Obteniendo como resultado que con el método de SRBD es más factible la producción del éster ya mencionado y concluyendo que el uso del método SRBD puede proporcionar un mayor porcentaje de eficiencia, en relación a la producción de éster de acetato, frente al método BRD.

**Bhatia et al. (2007)** realizaron un trabajo de investigación. "*Production of isopropyl palmitate in a catalyst distillation column: comparison between experimental and simulation studies*". Siendo el objetivo de su trabajo conocer los parámetros de diseño necesarios para mejorar el rendimiento de una columna de destilación reactiva para la producción del palmiato de isopropilo por esterificación del ácido palmítico con isopropanol, aquí fue indispensable el uso de la sílica gel como catalizador a una concentración de 5%(w/w) obteniendo una serie de datos el cual permite hacer un estudio de capacidad del comportamiento de los diferentes parámetros de operación, obtuvieron como resultado un proceso cuyo índice de capacidad dio  $C_{pk} > 1.33$ , concluyendo que el estudio es capaz de realizarse a las condiciones realizadas.

**Orjuela et al. (2006)**, en su artículo científico: "*Síntesis de acetato de butilo-2-cinética de reacción*". Realizaron el estudio de la reacción de esterificación de ácido acético y n-butanol en fase líquida ( $P_{atm} = 760 \text{ Bar}$ ), utilizando una resina de intercambio catiónico (Lewatit K-2431) como catalizador, obteniendo los parámetros siguientes: 0.5% cat,  $73^{\circ}\text{C}$ , AcAC: BuOh 2:1 para el modelamiento de la ecuación cinética, concluyéndose la ausencia de efectos difusivos al utilizar el catalizador heterogéneo y obteniendo un rendimiento de 60% por un periodo de 3 horas.

**Tischermeier (2003)**, realizó un trabajo de investigación: "*Determinación de las condiciones de equilibrio binario líquido vapor de tres reacciones rápidas de esterificación*". El autor simuló un proceso de destilación reactiva obteniendo datos de equilibrio de fase binaria por separado, aplicando el modelamiento de Wilson para obtener parámetros de temperatura y presión el cual nos pueda describir el comportamiento de la reacción del ácido fórmico con el isopropanol en una reacción de esterificación ( $40^{\circ}\text{C}$  to  $60^{\circ}\text{C}$ ) y así obtuvo resultados conformes dentro de la tolerancia, dando como máximo una conversión de un 50% según las condiciones mencionadas. Finalmente concluyendo que los nuevos parámetros eran los adecuados para obtener resultados con una alta conversión.

### 2.1.2. Antecedentes nacionales

**Velasque (2018)**, en su tesis la cual trata de la *“Influencia del efecto cinético de reacción y características de operación de los platos con caída de presión en columna de destilación reactiva, para la obtención de acetato de etilo de alta pureza”*. El objetivo es analizar el efecto cinético de la reacción en columnas de destilación reactiva para la obtención del acetato de etilo de alta pureza usando el software CHEMCAD. Además de simular el proceso en 2 etapas: la de procesos químicos y la de separación por destilación, obteniendo que a los parámetros de presión y concentración fueron 10 atmósferas y 77% mol de acetato de etilo, garantizando una óptima conversión.

**Medina (2017)** en su trabajo de investigación. *“Esterificación de ácido acético y etanol en un reactor batch con presencia de ácido sulfúrico como catalizador”*. El autor estudió la cinética de esterificación del ácido acético con etanol de un catalizador homogéneo con experimentos por lotes, los resultados obtenidos indicaron que la conversión de ácido acético aumenta cuando los parámetros de operación son de temperatura 70°C, 1,5% de concentración en ácido sulfúrico, 1/3 de la relación de concentración de alimentación y 400 ml de volumen de mezcla alcanzándose una conversión del 48% aproximadamente. Concluyó que la variación de los parámetros de operación (temperaturas de funcionamiento, concentración de catalizador, relación de concentración de reactantes y volumen de mezcla) influye de manera significativa en la reacción de esterificación de ácido acético y etanol en un reactor batch.

**Guerrero (2017)** en su Tesis nos dio a conocer el *“Modelamiento y simulación de procesos de obtención de acetato de metilo en un reactor semicontinuo esférico”*. El autor nos contribuye a la innovación utilizando las tecnologías limpias, en términos generales, menores costos, menor consumo, mayor selectividad y reacciones más limpias. El modelamiento desarrollado representa las distintas interacciones entre las fases presentes y la reacción reversible en proceso de esterificación, se trabajó con un reactor discontinuo en condiciones controladas a 3 temperaturas de reacción, las cuales fueron 50, 59 y 61°C, con porcentajes de conversión 96%, 87% y 92 %. Resultando que la condición de temperatura adecuada es a 61°C obteniéndose una  $K_{eq}$  igual a 5.23052. Guerrero concluyó que el modelamiento que desarrolló, le permitió contar con una nueva alternativa de operación, ya que en el modelamiento mencionado encontró una conversión alta de reactantes en un menor tiempo, espacio y además disminuir la contaminación.

**Ramírez (2015)** en su tesis la cual trata de la *“Obtención de acetato de etilo por destilación reactiva con resina acida como catalizador”*. La investigación fue realizado a escala de laboratorio cuyo principal objetivo fue la síntesis de acetato de etilo en fase líquida, en operación simultanea de reacción y destilación (destilación reactiva Batch), además estableció la factibilidad de implementación del proceso de esterificación a través de un arreglo de reacción de separación simultánea. Se logró conocer que el rendimiento del éster fue de un 60% del grado de conversión.



**Cajahuanca y Llacza (2009)**, en su tesis nos muestra el “*Estudio de la influencia de la temperatura del reactor Batch en la esterificación del acetato de etilo empleando el sistema de control secuencial en el laboratorio de operaciones y procesos unitarios*”. Los autores estudiaron la esterificación del acetato de etilo con la finalidad de evaluar la influencia de la temperatura en la reacción, se implementó un sistema de control secuencial en el lenguaje LADDER en la cual logró obtener una eficiencia de un 98% a las condiciones de 60°C comparándolo a otras condiciones de operación y concluyendo que el estudio de la temperatura en un proceso de reacción química está relacionado de manera directa con los parámetros.

## 2.2. Bases teóricas

### 2.2.1. Reactor Batch

Un Reactor químico es un recipiente donde se produce una reacción química, el de tipo Batch también llamado reactor por lotes no posee un flujo de entrada ni de salida, pero consta de una agitación que homogeniza la mezcla, así como poder establecer las condiciones de operación de temperatura y concentración de los reactivos que se piensan utilizar. En la ecuación de balance de materia para este reactor no se considera el flujo de entrada ni de salida, por lo tanto, los términos “Flujo de materia entrante” y “Flujo de materia saliente” se hacen nulos. (Levenspiel, 2009)

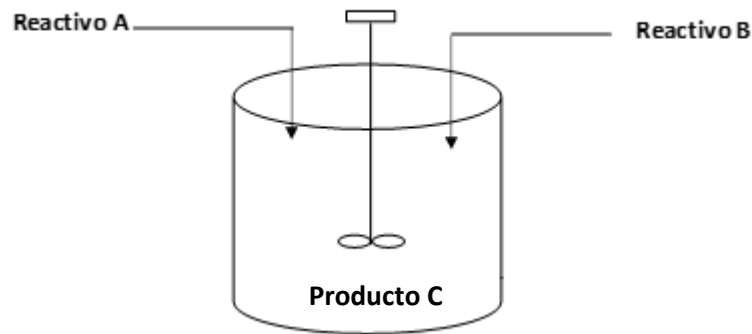
$$[\text{Flujo de materia Acumulada}] = [\text{Flujo de materia Entrante}] - [\text{Flujo de materia Saliente}] + [\text{Flujo de materia Reaccionante}]$$

$$[\text{Flujo de materia Acumulada}] = [\text{Flujo de materia Reaccionante}]$$

$$V \frac{dC_A}{dt} = 0 - 0 - kC^n V \quad (1)$$

### Figura 1

Sistema de un reactor Batch con reactivos A, B y producto C



**Fuente:** Introducción al diseño de reactores (Levenspiel, 2009).

#### 2.2.2. Acetato de isopropilo

El acetato de isopropilo también conocido como etanoato de isopropilo es un éster en forma de líquido incoloro con olor frutado. Ataca los plásticos y reacciona de forma violenta con materiales oxidantes, se emplean para la elaboración de solventes, perfumes, saborizantes y tintas de impresión. (Durst y Gokel, 2006)

En la siguiente tabla se describe las propiedades físicas y químicas del compuesto mencionado.

**Tabla 1**

*Propiedades físicas y químicas del Acetato de isopropilo*

<b>Propiedad</b>	<b>Descripción</b>
Estado físico	Líquido
Olor	Característico
Color	Incoloro, transparente
Punto de ebullición	77°C a 769 mmHg
Punto de fusión	-84°C
Masa molar	88,11 g/mol
Densidad relativa(agua=1)	0,9 g/cm <sup>3</sup> a 20°C
Solubilidad	Soluble en agua elevada

**Fuente:** Adaptado de Durst y Gokel (2006)

### **2.2.3. Ácido acético**

El ácido acético es un compuesto químico, también conocido como ácido metilcarboxílico o ácido etanoico. Es el componente principal del vinagre, se puede encontrar en forma de ion acetato, se emplea como aditivo en la industria de alimento por su capacidad para regular la acidez y su propiedad como conservador, también para las síntesis de otros ésteres. (Weissermel y Arpe, 1981)

En la siguiente tabla se describe las propiedades físicas y químicas del ácido acético.

**Tabla 2**

*Propiedades físicas y químicas del ácido acético*

<b>Propiedad</b>	<b>Descripción</b>
Estado físico	Líquido
Olor	Irritante
Color	Incoloro, transparente
Punto de ebullición	118°C a 769 mmHg
Punto de fusión	17°C
Densidad relativa	1,049 g/cm <sup>3</sup>
Masa molar	60,0211 g/mol
Solubilidad	Soluble en agua

**Fuente:** Tomado de “Obtención de acetato de metilo por destilación reactiva con resina acida como catalizador”, Proyecto de investigación de Durand, B. (2015).  
Universidad Nacional del Callao, Lima.

#### **2.2.4. Isopropanol**

El compuesto químico isopropanol, también conocido como alcohol isopropílico. A temperatura ambiente se presenta como un líquido ligero (de baja densidad), incoloro, inflamable y combustible. Su fórmula química semidesarrollada es  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$  (Chang, 2002).

Por otro lado, en el siguiente cuadro describimos las propiedades físicas y químicas del isopropanol.

**Tabla 3***Propiedades físicas y químicas del Isopropanol*

<b>Propiedad</b>	<b>Descripción</b>
Estado Físico	Líquido
Color	Incoloro, transparente
Punto de ebullición	83°C a 769 mmHg
Punto de fusión	-89 °C
Densidad Relativa	0,786 a 20°C/4°C
Masa Molar	60,10 g/mol
Solubilidad	Soluble en agua para cualquier proporción

**Fuente:** Adaptado de Flora Acuña Arias (2006).

### **2.2.5. Resina catalítica Lewatit S-1567**

Es una resina ácida de intercambio catiónico sulfonada en forma de gel muy fuerte, Se puede utilizar para una amplia variedad de aplicaciones de tratamiento de agua industrial tales como el ablandamiento del agua (en forma de Na<sup>+</sup>) así como para la desmineralización del agua (en forma de H<sup>+</sup>) en unidades regeneradas de flujo continuo.

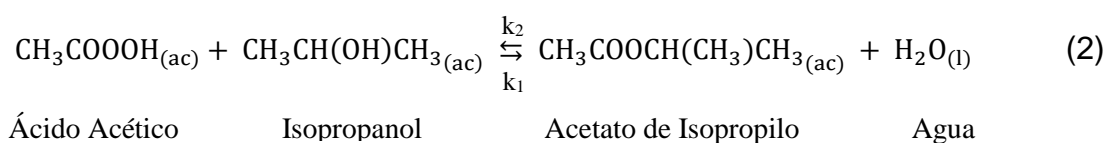
La resina Lewatit –S1567 confiere a los lechos de los filtros las siguientes características:

- Una alta velocidad de intercambio en la regeneración y la carga
- Una buena utilización de la capacidad total
- Un bajo consumo de agua de lavado
- Una distribución homogénea de los regenerantes, agua y soluciones, formando por ello, una zona de trabajo.

### 2.2.6. Esterificación

Se denomina esterificación al proceso que se utiliza para sintetizar un éster. La reacción de esterificación más habitual se da entre un ácido orgánico carboxílico ( $R - COOH$ ) y un alcohol ( $R' - OH$ ), obteniéndose un éster ( $R - COO - R'$ ) (Sánchez y Rodríguez, 1996)

La reacción de esterificación pasa por un ataque nucleofílico del oxígeno de la molécula del alcohol al carbono del grupo carboxílico. Por ejemplo: el acetato de isopropilo ( $CH_3COOCH(CH_3)CH_3$ ) se produce mediante la reacción entre el ácido acético ( $CH_3COOH$ ) e isopropanol ( $CH_3CH(OH)CH_3$ ) en medio ácido ( $H^+$ ). (Llaza y Cajahuanca, 2009)



### Estér

Es un compuesto derivado de la reacción química entre un alcohol y oxácido, pudiendo ser este último inorgánico como orgánico.

Son sustancias incoloras e hidrofóbicas (no se mezclan con agua). Los ésteres de bajo peso molecular suelen tener un olor característico. Muchos aromas naturales de plantas son ésteres y otros sintéticos son utilizados como aromas artificiales.

Habitualmente, se utilizan alcoholes de cadena corta, como el metanol o el etanol que reaccionan más rápidamente puesto que son moléculas pequeñas y no tienen cadenas ramificadas que dificulten el proceso. De igual forma ocurre con los

ácidos, cuanto más simples sean, más fácil es la formación del éster. (Yufera, 2007)

La facilidad de los alcoholes para formar esteres sigue el orden:

Primarios > Secundarios > Terciarios

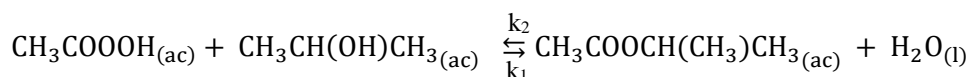
Del mismo modo, la facilidad de los ácidos sigue el orden:

$\text{HCOOH} > \text{H}_3\text{COOH} > \text{R} - \text{CH}_2\text{COOH}$

La esterificación catalítica se lleva a cabo frecuentemente con catalizadores ácidos. Los más comunes son el ácido clorhídrico (HCl) y el sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ), debido a su fuerte acidez. Estos catalizadores tienen la particularidad de estar disueltos en el medio de reacción y la separación suelen ser costosa, además de estar en contacto con el producto. Los catalizadores sólidos-ácidos como las resinas de intercambio iónico pueden separarse más fácilmente (por filtración) y son reutilizables (acidificándola para un nuevo uso). (Sánchez y Rodríguez, 1996 citado por Bernardino, 2015)

### 2.2.7. Cinética de la reacción

La esterificación se lleva a cabo haciendo reaccionar ácido acético e isopropanol, para producir 1 mol de acetato de isopropilo y 1 mol de agua, como se muestra a continuación.



$t = 0$	$C_{A_0}$	$C_{B_0}$	— —	$C_{D_0}$
$t > 0$	$C_{A_0} - X_A$	$C_{B_0} - X_A$	$X_A$	$X_A$
$t = t$	$C_A$	$C_B$	$C_C$	$C_D$

Si la reacción se lleva a cabo en la condición  $C_{A_0} = C_{B_0}$  y si  $k_1$  es la constante de velocidad de formación de productos y  $k_2$  es la constante de velocidad de regeneración de los reactantes.

### Velocidad de reacción

La velocidad de formación de acetato de isopropilo será:

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_1 * C_A * C_B - k_2 * C_C * C_D \quad (3)$$

Sabiendo que:

$$C_A = C_{A_0}(1 - X_A)$$

$$C_B = C_{A_0}(\theta_B - X_A)$$

$$C_C = C_{A_0}X_A$$

$$C_D = C_{A_0}(\theta_D + X_A)$$

Donde las constantes y la derivada de la concentración son:

$$\theta_B = \frac{C_{B_0}}{C_{A_0}} \quad \text{y} \quad \theta_D = \frac{C_{D_0}}{C_{A_0}}$$

$$dC_A = -C_{A_0} \cdot dX_A$$

Reemplazando en la ecuación de la velocidad (3)

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

Se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{dX_A}{dt} = k_1 * C_{A_0} * (1 - X_A)(\theta_B - X_A) - k_2 * C_{A_0} * X_A * (\theta_D + X_A) \quad (4)$$

Conociendo las siguientes condiciones en equilibrio:

$$\frac{dX_A}{dt} = 0 \quad , \quad K_C = \frac{k_1}{k_2} = \frac{C_C * C_D}{C_A * C_B} \quad (5)$$



Reemplazando los valores de  $C_A$ ,  $C_B$ ,  $C_C$  y  $C_D$  en la ecuación (5)

$$K_C = \frac{k_1}{k_2} = \frac{C_{A_0} * X_A * C_{A_0} * (\theta_D + X_A)}{C_{A_0} (1 - X_A) * C_{A_0} (\theta_B - X_A)} \quad (6)$$

Ahora se reemplaza  $X_e$  por  $X_A$ , debido al equilibrio, obteniendo:

$$k_1 * C_{A_0} * (1 - X_A) * C_{A_0} * (\theta_B - X_A) = k_2 * C_{A_0} * X_A * C_{A_0} (\theta_D + X_A)$$

Despejando  $k_2$ :

$$k_2 = k_1 * \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e(\theta_D + X_e)} \quad (7)$$

Reemplazando  $k_2$  en la ecuación (4):

$$\frac{dX_A}{dt} = k_1 * C_{A_0} * (1 - X_A) * (\theta_B - X_A) - k_1 * \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e(\theta_D + X_e)} * C_{A_0} * X_A * (\theta_D + X_A)$$

Reduciendo la expresión:

$$\frac{dX_A}{C_{A_0} \cdot dt} = k_1 \left[ (1 - X_A)(\theta_B - X_A) - \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e(\theta_D + X_e)} (\theta_D + X_A) X_A \right]$$

$$\frac{dX_A}{k_1 \cdot C_{A_0} \cdot dt} = (1 - X_A)(\theta_B - X_A) - \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e(\theta_D + X_e)} (\theta_D + X_A) * X_A$$

$$\frac{dX_A}{k_1 * C_{A_0} * dt} = (\theta_B - X_A \cdot \theta_B - X_A + X_A^2) - \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)\theta_D}{X_e(\theta_D + X_e)} X_A - \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e(\theta_D + X_e)} X_A^2$$

Ordenando y agrupando  $X_A$ :

$$\frac{dX_A}{k_1 \cdot C_{A_0} \cdot dt} = \theta_B - \left( \theta_B + 1 + \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)\theta_D}{X_e(\theta_D + X_e)} \right) X_A + \left( 1 - \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e(\theta_D + X_e)} \right) X_A^2 \quad (8)$$

Despejando y pasando a aplicar una integral indefinida, tenemos:

$$\int \frac{dX_A}{\left[ \theta_B - \left( \theta_B + 1 + \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)\theta_D}{X_e(\theta_D + X_e)} \right) X_A + \left( 1 - \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e(\theta_D + X_e)} \right) X_A^2 \right]} = \int k_1 \cdot C_{A_0} dt$$

Luego, aplicamos la identidad conocida:

$$y(x) = \int \frac{dx}{ax^2 + bx + c} = \frac{1}{\sqrt{b^2 - 4ac}} \cdot \text{Ln} \left( \frac{2ax + b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2ax + b + \sqrt{b^2 - 4ac}} \right) \quad (9)$$

Donde:

$$a = 1 - \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e(\theta_D + X_e)}$$

$$b = -(\theta_B + 1 + \frac{(1-X_e)(\theta_B-X_e)\theta_D}{X_e(\theta_D+X_e)})$$

$$c = \theta_B$$

Integrando la ecuación (8) en función a la ecuación (9) se obtendrá:

$$y(x) = mx + b = k_1 * C_{A_0} \cdot t + \text{Const}$$

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{b^2-4ac}} \cdot \text{Ln} \left( \frac{2aX_a + b - \sqrt{b^2-4ac}}{2aX_a + b + \sqrt{b^2-4ac}} \right) = k_1 * C_{A_0} \cdot t + \text{Const} \quad (10)$$

Donde “m” será hallado por regresión lineal:

$$k_1 = \frac{m}{C_{A_0}} \quad (11)$$

Finalmente se despeja la constante  $k_1$  sabiendo que la reacción es de segundo orden por consecuente que las unidades dichas constante serán ( $\text{mol L}^{-1} \text{t}^{-1}$ ).

Se debe probar si el modelo cinético es factible para ajustar una línea recta con las variables Y vs t (min) y poder hallar el valor de la constante  $k_2$ .

### 2.2.8. Catálisis homogénea y heterogénea

El catalizador es una sustancia que incrementa la velocidad de una reacción que avanza hacia el equilibrio, sin ser consumido en el proceso.

Es de vital importancia aclarar que un catalizador no puede cambiar la conversión en el equilibrio, la cual está determinada por la termodinámica química, y su papel está restringido a la aceleración de la velocidad de una determinada reacción, o a la inhibición de reacciones no deseadas (Carballo, 2002).

La catálisis es la ciencia que estudia los fenómenos que ocurren cuando un catalizador actúa. En los estudios de catálisis se acostumbra a distinguir, según el número de fases participantes en la reacción, entre catálisis homogénea, que

comprende sistemas catalíticos formados por una sola fase gas o líquida, y la catálisis heterogénea que incluye aquellos por dos o más fases, como gas-sólido, líquido-sólido, gas-líquido-sólido, etc.

Además, la catálisis heterogénea es el área del conocimiento que trata del estudio de los fenómenos fisicoquímicos que ocurren cuando un material extraño (catalizador) actúa sobre otras sustancias (reactantes) que se le aproximan a su campo de fuerzas superficiales externas, afectando en ellas su velocidad (actividad) y dirección (selectividad) de transformación en los diferentes productos viables termodinámicamente (Carballo, 2002). En catálisis heterogénea el catalizador que actúa se encuentra en una fase diferente a la de los reactantes y productos.

### **2.2.9. Resina de intercambio iónico**

El cambio industrial hacia procesos que son más respetuosos con el medio ambiente inició el paso de la catálisis homogénea a la catálisis heterogénea. Al considerar catalizadores ácidos, las ventajas entre otras de los catalizadores heterogéneos frente a los catalizadores homogéneos son (Harmer, 2001, citado por Londoño, 2015).

- Reducción de la corrosión del equipo
- Disminución en los costos de separación
- La selectividad de la reacción también podría ser mejor que la alcanzada con un catalizador homogéneo.

Una resina de intercambio catiónico es una matriz de polímero insoluble que puede intercambiar iones con la mezcla adyacente. Las resinas usualmente están formadas por la copolimerización de estireno con divinilbenceno, que actúa como agente de reticulación (Renier, 2006). La cantidad de reticulación tiene un

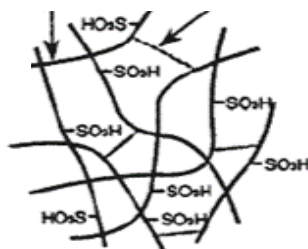
pronunciado efecto en la capacidad de la resina a hincharse cuando se sumerge en solución (Laatikainen, 2002, citado por Londoño, 2015).

Las resinas de intercambio iónico son susceptibles a la sorción de componentes polares, y el agua en particular. La sorción selectiva de agua disminuye la cantidad de sitios activos disponibles para que la reacción se propague, inhibiendo de este modo la velocidad de reacción (Vaidya, 2003, citado por Karina Londoño, 2015).

## Figura 2

*Estructura de una resina de intercambio iónico Lewatit S-1567*

*DVD (reticulante)*



Fuente: Adaptado de Ehteshami (2006).

### 2.2.10. Modelos de reacción sobre resinas de intercambio catiónico

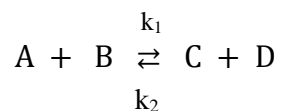
#### Modelo Pseudo Homogéneo (MPH)

Para que ocurra una reacción en presencia de un catalizador heterogéneo, los reactivos primero necesitan viajar desde el seno del fluido, hasta la superficie del catalizador, de aquí los reactivos tienen que difundirse en los poros del catalizador y, por último, se absorben en la superficie del catalizador (Renier, 2006)

Cuando se utilizan cinética de reacción en estado pseudo homogéneo para describir la reacción, la adsorción de los reactivos en la superficie del catalizador se supone que es despreciable (Renier, 2006)

La ecuación de la velocidad de la reacción química estará escrita de la siguiente manera.

Rxn:



Donde  $r_a$ ,

$$r_a = -k'_1 \left( C_A C_B - \frac{1}{K_C} C_C C_D \right)$$

Donde  $K_C$ ,

$$K_C = \frac{k'_{1}}{k'_{-1}} = \frac{C_C C_D}{C_A C_B} \quad (12)$$

Donde,  $r_a$  es una la velocidad de reacción en términos de la cantidad de catalizador seco ( $m_{cat}$ ),  $k'_1$  es la velocidad de reacción directa y  $K_C$  es la constante de equilibrio basada en la concentración de los reactivos en la mezcla líquida. A, B, C y D representan metanol, ácido acético, acetato de metilo y agua respectivamente. Con la determinación de la constante de equilibrio basada en la concentración de la fase líquida, se implica que la mezcla líquida es ideal y que el volumen de la mezcla líquida permanece constante.

Cuando se considera la mayoría de las reacciones catalizadas por un catalizador heterogéneo, la reacción en la superficie del catalizador es más compleja que una ecuación de reacción elemental normal y los mecanismos no son tan fácilmente reducibles para lograr una ecuación de velocidad pseudo homogénea.

Para una solución ideal según (Londoño, 2015) la ecuación de la velocidad de reacción será expresada de la siguiente manera.

$$-r_a = k_f x_A x_B - k_r x_C x_D \left( x_A x_B - \frac{k_r}{k_f} x_C x_D \right) \quad (13)$$

Donde  $x_i$  es la fracción molar de cada componente,  $k_f$  y  $k_r$  son las constantes de velocidad de avance y retroceso de la reacción respectivamente, cada constante se expresa de en función de la temperatura como se indica en la ecuación.

$$k_f = A_f \exp\left(\frac{-E_{a,f}}{RT}\right) \quad (14)$$

$$k_r = A_r \exp\left(\frac{-E_{a,r}}{RT}\right) \quad (15)$$

Y la entalpía molar de reacción se define como:

$$\Delta h_f = E_{0,f} - E_{0,r} \quad (16)$$

Sustituyendo las ecuaciones (16), (15) y (14) en la ecuación (13) la expresión de una reacción suponiendo una solución ideal sería:

$$-r_a = A_f \exp\left(\frac{-E_{a,f}}{RT}\right) \left[ x_A x_B - \frac{A_r}{A_f} \exp\left(\frac{-\Delta h_f}{RT}\right) x_C x_D \right] \quad (17)$$

### 2.2.11. Diseños experimentos (DOE)

El diseño de experimentos (DOE) ayuda a investigar los efectos de las variables de entrada (factores) sobre una variable de salida (respuesta) al mismo tiempo. Estos experimentos consisten en una serie de corridas, o pruebas, en las que se realizan cambios intencionales en las variables de entrada. En cada corrida se recolectan datos. El DOE se utiliza para identificar las condiciones del proceso y los componentes del producto que afectan la calidad, para luego determinar la configuración de factores que optimiza los resultados. (Kavanaugh, 2002)

#### Método Taguchi

Es una herramienta que puede ser usada en las etapas de diseño de productos y procesos con el objetivo de identificar los factores controlables que nos permitan

minimizar la variación de los factores de ruido (no pueden ser controlados) y mejorar la calidad de los resultados obtenidos.

**Tabla 4**

*Arreglo octogonal "L9" de Taguchi para 4 factores y 3 niveles*

Corrida	Factores			
	A	B	C	D
n1	1	1	1	1
n2	1	2	1	2
n3	1	3	2	3
n4	2	1	1	3
n5	2	2	2	1
n6	2	3	1	2
n7	3	1	2	2
n8	3	2	1	3
n9	3	3	1	1

Fuente: Elaboración propia

### 2.2.12. Dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura

La ecuación de Van't Hoff relaciona de la dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura. La ecuación puede derivarse de la ecuación de Gibbs- Helmholtz, que da la dependencia de la temperatura de la energía libre de Gibbs.

$$\left[ \frac{\partial \left( \frac{\Delta G^0}{T} \right)}{\partial \left( \frac{1}{T} \right)} \right] = \Delta H^0 \quad (18)$$

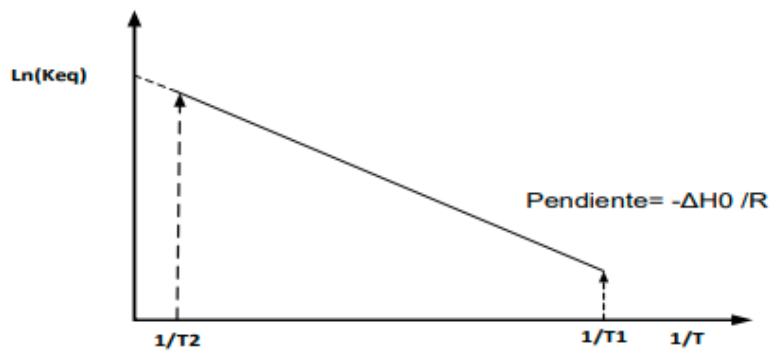
Sustituyendo la expresión  $\Delta G^0 = -RT \ln(K_{eq})$  dividiendo ambos lados por -R, la primera forma del van't Hoff.

$$\left[ \frac{\partial \ln(K_{eq})}{\partial \left(\frac{1}{T}\right)} \right] = - \frac{\Delta H^0}{T} \quad (19)$$

Graficando  $\ln(K_{eq})$  con respecto a  $1/T$

### Figura 3

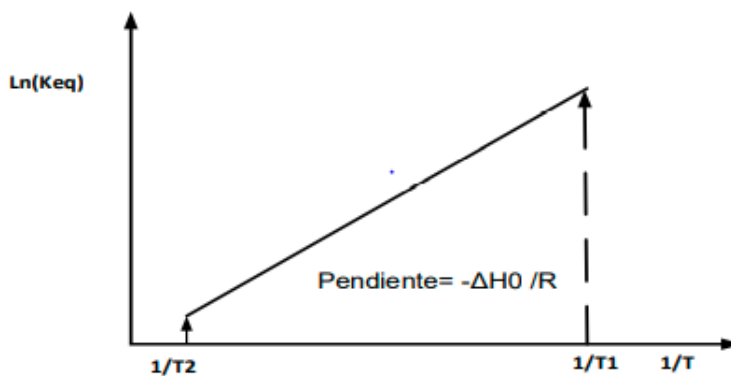
Dependencia de la constante de equilibrio ( $K_{eq}$ ) respecto a la temperatura ( $T$ ) para una reacción exotérmica



**Fuente:** Referencia de “Esterificación de ácido acético y etanol en un reactor batch con presencia de ácido sulfurico como catalizador”. Informe final de investigación (Medina, 2017).

### Figura 4

Dependencia lineal de la constante de equilibrio ( $K_{eq}$ ) respecto a  $T$  para una reacción endotérmica



**Fuente:** Referencia de “Esterificación de ácido acético y etanol en un reactor batch con presencia de ácido sulfurico como catalizador”. Informe final de investigación (Medina, 2017)



La forma integrada de la ecuación de van't Hoff es

$$\ln\left(\frac{K_1}{K_2}\right) = -\frac{\Delta H^0}{R} \left[ \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right] \quad (20)$$

Donde:

Para una reacción exotérmica: el aumento de la temperatura no favorece la reacción directa  $\Delta H$  es negativo, por lo tanto, al aumentar T disminuye  $K_c$ .

### **Cálculo de la constante de equilibrio a partir de las propiedades termodinámicas**

$$\Delta G^0 = -RT \ln(K_{eq}) \quad (21)$$

A cualquier temperatura dada, el cambio en la energía libre de Gibbs se puede escribir a partir de la definición de energía libre de Gibbs

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \Delta S^0 \quad (22)$$

Sustituyendo esta relación en la ecuación, la forma lineal del Van't Hoff se convierte en:

$$\ln(K_{eq}) = -\frac{\Delta H^0}{RT} + \frac{\Delta S^0}{R} \quad (23)$$

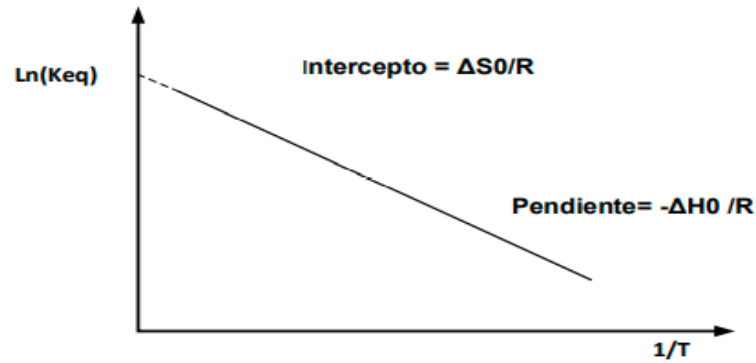
Donde:

$\Delta S^0$  es la entropía estándar a 298 K en J/K,  $\Delta H^0$  entalpía estándar a 298 K en J/mol y  $R=8,314$  J/mol K constante universal J/mol K y T es la temperatura de reacción (K).

Posteriormente se presenta un gráfico de  $\ln(K_{eq})$  en el eje de ordenadas y en el eje de la abscisa  $1/T$ .

### Figura 5

Dependencia lineal de constante de equilibrio  $\ln K_{eq}$  respecto a  $1/T$



**Fuente:** Referencia de “Esterificación de ácido acético y etanol en un reactor batch con presencia de ácido sulfurico como catalizador”. Informe final de investigación (Medina, 2017).

### Cálculo de la entropía, entalpía y energía libre de Gibbs de la reacción

Para poder determinar, procedemos a averiguar la entalpía de formación, energía libre de Gibbs y entropía de formación de los reactantes y productos, donde lo veremos en la siguiente tabla:

**Tabla 5**

Entalpía de formación, energía libre de Gibbs y entropía de formación

N°	SUSTANCIA	P. F	$\Delta H^0 \left( \frac{kJ}{mol} \right)$	$\Delta G^0 \left( \frac{kJ}{mol} \right)$	$\Delta S^0 \left( \frac{J}{mol \cdot K} \right)$
1	$CH_3COOH_{(ac)}$	60,05	-434,84	-376,69	-195,03
2	$CH_3CH_2CH_2OH_{(ac)}$	60,09	-257,53	-162,97	-318,80
3	$CH_3COOCH_2CH_2CH_3_{(ac)}$	102,1	-464,80	-320,40	-486,90
4	$H_2O_{(l)}$	18,01	-241,80	-228,60	-44,270

**Fuente:** Datos obtenidos de YAWS, L. CARL, 1999 [30] (ver anexo 3).

De la tabla 5 se requieren los datos de entalpías de la reacción de esterificación, energía libre de Gibbs y entropía de la reacción a una temperatura de 298K, luego las energías ( $\Delta H, \Delta S, \Delta G$ ) estándar de la reacción se calculan con la siguiente ecuación.

$$\Delta E_r^0 = \sum(\text{productos}) - \sum(\text{reactantes}) \quad (24)$$

Siendo:

$\Delta E_r^0$  = Energía estándar de la reacción a una temperatura de 298 K ( $\Delta H, \Delta S, \Delta G$ )

$\sum(\text{producto})$  = Sumatorias de los ( $\Delta H, \Delta S, \Delta G$ ) de los productos a 298 K

$\sum(\text{reactante})$  = Sumatorias de los ( $\Delta H, \Delta S, \Delta G$ ) de los reactantes a 298 K

Con los valores de las energías de Entalpía, Entropía y Gibbs encontradas en la reacción de esterificación de nuestro sistema ácido acético – alcohol isopropílico se determinará la constante cinética de equilibrio “Kc” y su comportamiento respecto a la temperatura.

### 2.3. Conceptual

El diseño del proceso de síntesis del acetato de isopropilo utilizando una resina de intercambio iónico se encuentra encaminado por diversos factores que son crítico para obtener un óptimo rendimiento del proceso.

El proceso desarrollado describe lo siguiente:

El reactor consiste en un recipiente en el cual puede ocurrir una reacción química (homogénea o heterogénea), no posee un flujo de entrada ni uno de salida, por lo que se encuentra en un estado estacionario, donde se puede observar que la composición del producto cambia con el tiempo. En nuestro caso se planteó la

idea de utilizar un balón de una capacidad de 1L combinado a un agitador magnético para poder realizar la simulación de un reactor a nivel piloto.

En la etapa de catálisis nos enfocamos en sostener la resina de intercambio iónico de tipo ácido ( $\text{HSO}_3^-$ ) como sustituto perfecto del catalizador ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) en estado líquido.

También aplicamos un reflujo que nos permite separar el producto más volátil que se presenta durante la reacción química de esterificación, esto nos permite aprovechar al máximo la eficiencia de los reactivos y no desperdiciar nada.

Asimismo, utilizamos un agitador con calefactor el cual nos brinda las variables operativas necesarias para realizar la reacción de esterificación a las diferentes condiciones que necesitamos para el estudio.

#### **2.4. Definición de términos básicos**

**Catálisis.**- Es el proceso por el cual se aumenta la velocidad de una reacción química, debido a la participación de una sustancia llamada catalizador.

**Catalizador.** - Sustancia que acelera o retarda una reacción química sin participar en ella, los catalizadores positivos aceleran la reacción, mientras que los negativos, o inhibidores, la retardan.

**Esterificación.** - Es una reacción o proceso químico por el cual se sintetiza un éster mediante el mecanismo tradicional de reacción entre el ácido [ $\text{H}^+$ ] y un alcohol [ $\text{OH}^-$ ].

**Reactor Batch.** - Conocido como reactor por lotes o reactor Intermitente, es bien usado a menudo para las investigaciones cinéticas dentro del laboratorio y también en operaciones industriales.

**Reacción homogénea.** - Son aquellas reacciones que se llevan a cabo en una sola fase (líquida o gaseosa).

**Reacción heterogénea.** - Son aquellas reacciones que se llevan en más de una fase (líquida y heterogénea).

**Reacción química.** - Es el proceso en el cual intervienen dos tipos de sustancias conocidas como reactivos.

**Resina de intercambio iónico.** - Son materiales sintéticos, normalmente esferas de 0,5-1 mm de diámetro. Están formadas por una matriz polimérica a la que se le han unido una gran cantidad de radicales polares, ácidos o bases.

### III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

#### 3.1 Hipótesis

##### 3.1.1. Hipótesis general

Para evaluar las variables de operación mediante un reactor Batch en la síntesis del acetato de isopropilo, usando la resina de intercambio iónico, dependerá del desempeño cada uno de los parámetros para obtener una conversión de  $X_A = 0.55$ .

### 3.1.2. Hipótesis específicas

- a) La expresión cinética será determinada con las constantes de equilibrio  $K_1$  y  $K_2$  mediante la correlación de la temperatura de la reacción de síntesis del acetato.
- b) El desempeño del catalizador se verá reflejado conforme se obtenga un óptimo grado de conversión en la síntesis del éster.
- c) La temperatura y velocidad de agitación se determinarán conforme se obtenga una conversión adecuada en el proceso de síntesis del éster.

### 3.2 Definición conceptual de variables

El porcentaje de conversión será una de las variables que nos permitirá evaluar la eficiencia de nuestro proceso, así mismo esta variable está ligada a la concentración que puede tener los reactivos, la cantidad de catalizador heterogéneo y por últimos los parámetros operacionales que nos permitirán controlar el proceso.

#### Variable Dependiente

$F(Y) = \%$  de conversión de los reactantes

#### Variable Independiente

$X_1 =$  Relación de concentraciones.

$X_2 =$  Concentración de catalizador

$X_{3,4} =$  Temperatura y velocidad de agitación

#### 3.2.1. Operacionalización de las variables

A continuación, se presenta la matriz operacional

VARIABLES	Definición conceptual	Dimensiones (magnitudes)	Indicadores	Método
<b>Independientes</b>				
$X_1$ = Relación de concentraciones.	Determinaremos cual es la relación de la concentración de los reactantes adecuada para la obtención del acetato de isopropilo.	$X_1$ = Relación molar	$X_{1.1}$ = Molar, mg/L	Experimental
$X_2$ = Concentración de catalizador.	Determinaremos cual será la concentración requerida de catalizador que se adicionará en el proceso de obtención del acetato de isopropilo.	$X_2$ = Concentración	$X_{2.1}$ = % w/w	Experimental
$X_3$ = Temperatura y velocidad de agitación	Se encontrarán la temperatura y velocidad de agitación necesaria para el proceso de obtención del acetato de isopropilo.	$X_3$ = Temperatura $X_4$ = Agitación	$X_{3.1}$ = Celsius (°C) $X_{4.1}$ = Rpm	Experimental e Instrumental Medición
<b>Dependiente</b>				
$Y$ = % de conversión del producto	Se realizarán procedimientos necesarios para determinar la obtención del % de conversión del producto.	$Y_1$ = % de conversión del producto	$Y_1 = \% X_A$	Experimental Estadístico

## IV. DISEÑO METODOLÓGICO

### 4.1 Tipo y diseño de la investigación

Por su finalidad, la presente investigación se aplicó para resolver problemas de naturaleza práctica. Por su profundidad se caracteriza por ser explicativa, ya que se medirán las variables dependientes, estudiará las relaciones de influencia de las variables independientes, y de esta manera buscará el porqué del fenómeno mediante las relaciones de causa–efecto. Finalmente, por el diseño interpretativo la investigación se caracteriza por ser experimental, ya que este tipo de investigación nos permite controlar, alterar o manipular el factor causal con el fin de determinar el efecto deseado por el análisis de las variables involucradas son cuantitativas.

- **Hipótesis nula ( $H_0$ ):** No existe influencia entre los parámetros de operación que nos permita obtener una conversión de  $X_A = 0.50$ .
- **Hipótesis alternativa ( $H_1$ ):** Existe influencia al menos de uno de los parámetros de operación que nos permita obtener una conversión de  $X_A = 0.50$ .

### 4.2 Metodología de la investigación

El método utilizado fue experimental, para esto mencionamos la secuencia de pasos y los requerimientos necesarios para llevar a cabo la realización del presente trabajo.

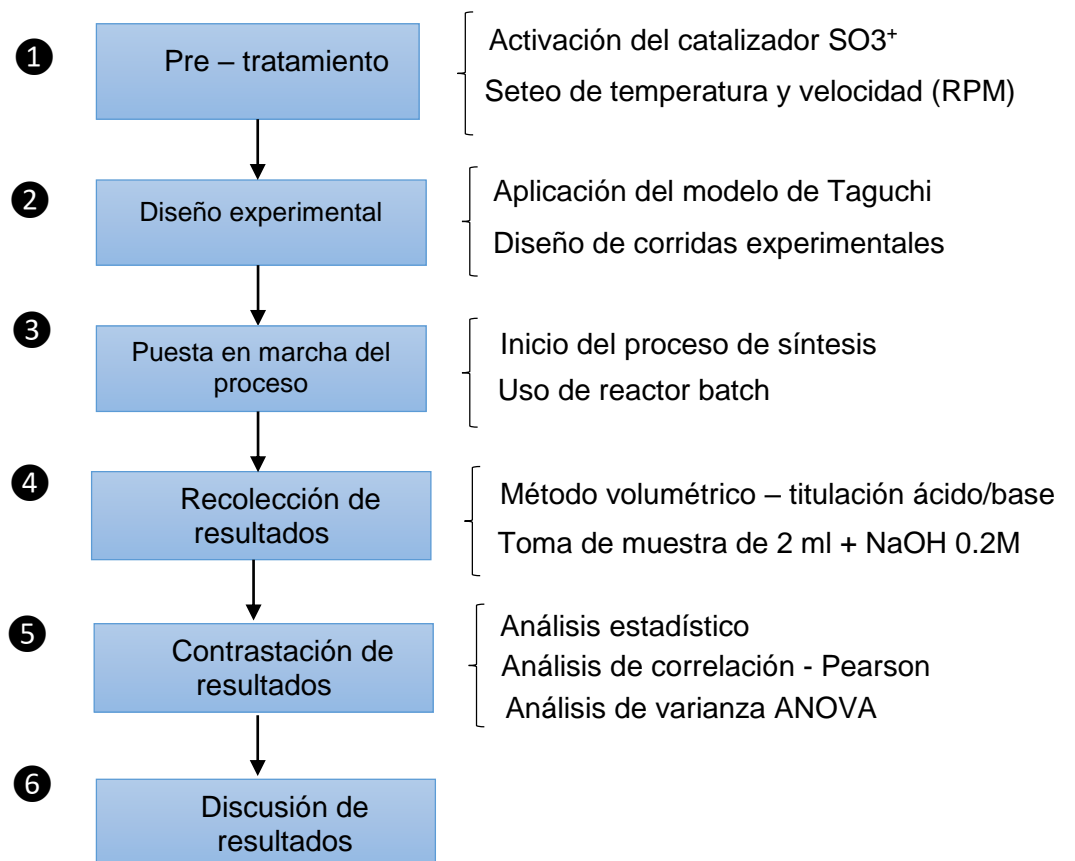


## Etapas del proceso

- Activación de la resina Lewatit S-1567
- Puesta en marcha
- Cuantificación de reactante restante mediante titulación con fenolftaleína.
- Recolección de datos estadísticos
- Análisis de resultados

**Figura 6**

*Esquema de las etapas del proceso*



**Fuente:** Elaboración propia

## Requerimiento

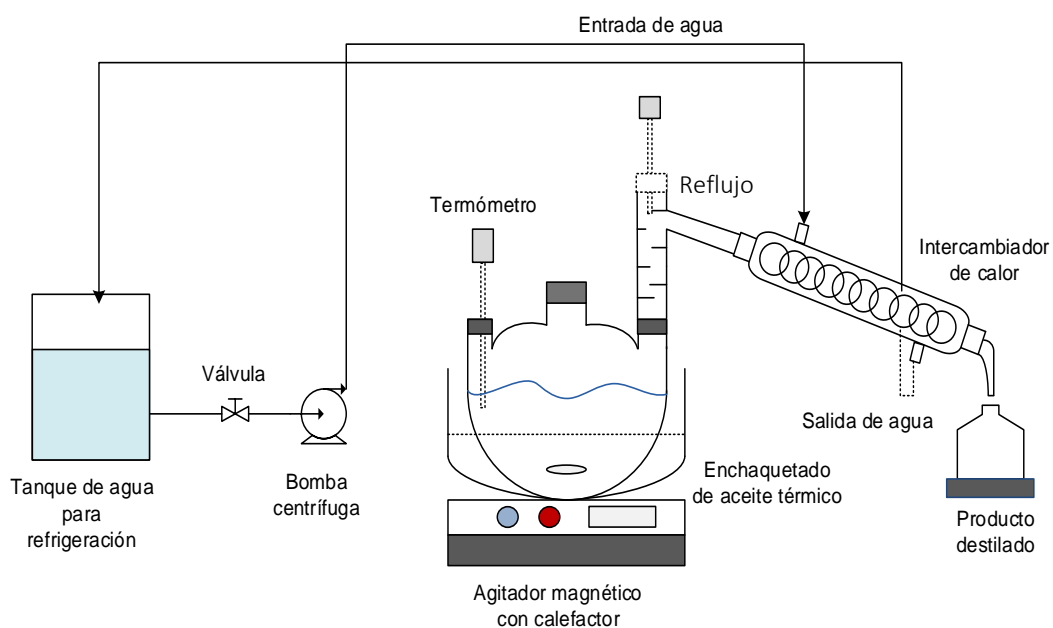
- Reactivos
  1. Agua destilada
  2. Ácido acético de grado 99,8 % QP
  3. Isopropanol grado QP
  4. Solución de NaOH 0.5 M
  5. Indicador fenolftaleína 1%
  6. Aceite de cocina
  7. Resina catalítica Lewatit S-1567
  
- Materiales
  1. Vasos precipitados de 5 ml, material pírex (10 unidades)
  2. Balón de 3 bocas de 1L, material pírex (1 unidad)
  3. Refrigerante de material de vidrio (1 unidad)
  4. Probeta de 100 ml, material pírex (2 unidades)
  5. Piceta (1 unidad)
  6. Respirador con filtro de carbón activado 3M (1 unidad)
  7. Lentes protectores (3 unidades)
  8. Pipetas graduadas de 5 ml (4 unidades)
  9. Propipetas (2 unidades)
  10. Matraz Erlenmeyer (10 unidades)
  11. Bureta de 100 ml, material de pírex (1 unidad)
  12. Densímetro calibrado (1 unidad)
  13. Termómetro digital, manual.
  
- Equipos
  1. Agitador con calefactor – marca “OXFORD”
  2. Equipo de titulación
  3. Reactor batch (Elaboración propia)
  4. Sistema de recirculación de agua

## Equipo experimental

El equipo experimental consistió en un recipiente esférico de 3 bocas, con una capacidad de 1000 ml, incorporado con un intercambiador de calor que a la vez actúa como condensador. Un agitador magnético con calefacción para homogenizar la mezcla de reacción. Al recipiente de reacción se colocó un termómetro digital para regular la temperatura (ver figura 7).

**Figura 7**

*Equipo para la reacción de esterificación*



**Fuente:** Elaboración propia

### 4.3 Población y muestra

Según la naturaleza de la investigación no aplica.

### 4.4 Lugar de estudio y periodo desarrollado

El lugar de estudio fue el Laboratorio de Operaciones Unitarias (LOPU) de la Facultad de Ingeniería Química en la Universidad Nacional del Callao, resaltando que la experimentación se realizó antes de la pandemia.

### 4.5 Técnicas e instrumentos para la recolección de la información

#### 4.5.1 Técnica de titulación

Se mide el consumo de ácido acético a través de la titulación de 2 ml de muestra tomada del reactor utilizando NaOH (0.2 N) y fenolftaleína como indicador. A partir de esta valoración, la cantidad de ácido sin reaccionar se usará en la determinación de datos cinéticos. Se utiliza una bureta de 100 ml para valorar nuestras muestras.

Los pasos necesarios para lograr esto se enumerarán a continuación:

1. Preparar NaOH a 0.2M para los experimentos.
2. La concentración de ácido acético se determina por titulación usando NaOH de 0.2M preparado anteriormente.
3. Para el cálculo de la concentración del ácido se utiliza la siguiente ecuación.

$$N_A V_A = N_B V_B \rightarrow N_A = \frac{N_B V_B}{V_A} \quad (25)$$

Donde:

$N_A$  = Normalidad del ácido acético

$V_A$  = Volumen tomado de la mezcla (2ml)

$N_B$  = Normalidad del hidróxido de sodio (0.2 N)

$V_B$  = Volumen de NaOH gastado

#### 4.5.2 Determinación de los volúmenes de los reactantes

Los experimentos se realizarán con una relación molar de ácido acético/alcohol en 1:1, 1:2 y 2:1 para lo cual calculamos los volúmenes, tomando como referencia la primera relación molar de los reactantes (1:1), mediante las siguientes ecuaciones:

$$R = \frac{n_{HAC}}{n_{IPOH}} = \frac{1}{1} \quad (26)$$

A partir de la ecuación (26) formamos una ecuación para determinar el volumen del alcohol correspondiente:

$$\frac{\rho_{HAC} * V_{HAC}}{PM_{HAC}} = \frac{\rho_{IPOH} * V_{IPOH}}{PM_{IPOH}}$$
$$V_{IPOH} = \frac{\rho_{HAC} * V_{HAC} * PM_{IPOH}}{\rho_{IPOH} * PM_{HAC} * R} \quad (27)$$

Pero sabemos que:

$$V_{IPOH} + V_{HAC} = V_{total} \quad (28)$$

Reemplazando las ecuaciones (26) y (27) en la ecuación (28)

obtenemos:

$$\frac{\rho_{HAC} * V_{HAC} * PM_{IPOH}}{\rho_{IPOH} * PM_{HAC} * R} + 1V_{HAC} = V_{total} \quad (29)$$

Donde:

$$\rho_{HAC} = 1.05 \frac{g}{ml} \quad (30)$$

$$\rho_{\text{IPOH}} = 0.786 \frac{\text{g}}{\text{ml}} \quad (31)$$

$$PM_{\text{IPOH}} = 60.1 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \quad (32)$$

$$PM_{\text{HAc}} = 60.05 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \quad (33)$$

$$V_{\text{total}} = 250 \text{ ml}$$

Sustituyendo los valores numéricos en la ecuación (29):

$$1.336 V_{\text{HAc}} + 1V_{\text{HAc}} = 250 \text{ ml} \quad (34)$$

Donde se obtendrá:

$$V_{\text{HAc}} = 107 \text{ ml}$$

Reemplazando el dato obtenido en la ecuación (28) obtenemos:

$$V_{\text{IPOH}} = 143 \text{ ml}$$

Asimismo, aplicamos las ecuaciones para determinar los volúmenes de los reactantes para las siguientes relaciones molares mencionadas, donde los datos obtenidos lo colocamos en el siguiente cuadro:

**Tabla 6**

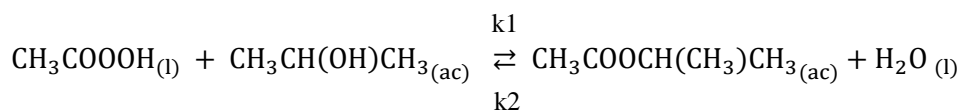
*Distribución de Volúmenes del sistema*

Relación molar de reactantes	Volumen de ácido (ml)	Volumen de alcohol (ml)	Volumen de mezcla (ml)
1:1	107	143	250
1:2	68	182	250
2:1	150	100	250

**Fuente:** Elaboración propia

#### 4.5.3 Evaluación de la cinética de esterificación

##### 1. Ecuación estequiométrica



2. Postulado de expresión cinética

$$-r_A = kC_A^\alpha C_B^\beta$$

3. Seleccionar el tipo de reactor y correspondiente al 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 de  $C_A$  vs tiempo

5. Expresión cinética

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^\alpha C_B^\beta$$

Donde  $\alpha, \beta$  y  $k$  son desconocidas

6. Ejecute los experimentos de esterificación de la siguiente manera:

- Operación isotérmica

Ejecutar el experimento a temperatura constante para determinar  $k$  y determinar el coeficiente  $\alpha$  y  $\beta$ .

- Operación no isotérmica

Ejecutar el experimento a diferentes temperaturas para ver el efecto de la temperatura en la constante de reacción “ $k$ ” calcula la energía de activación y factor de frecuencia.

#### 4.5.4 Técnica de análisis, métodos estadísticos y aplicación para conversión de la información colectada en datos elaborados.

La muestra obtenida en ambos casos es analizada por titulación utilizando solución estándar de NaOH 0.2 M empleando fenolftaleína como indicador, hasta que cambie de color a rosa pálida, reportándose el volumen de solución de NaOH 0.2 M gastado en la neutralización de cada muestra y con este valor se determina los moles convertidos de ácido acético en producto en cada intervalo.

A continuación, se describe el cómo se determina el avance de la esterificación.

La evaluación del número de moles de ácido acético ( $H_{AC}$ ) convertido en acetato de etilo durante un intervalo de tiempo, se determina tomando 2 ml de muestra y se cuantifica por titulación con una solución de NaOH 0.2 M usando como indicador gotas a la fenolftaleína.

$$X_{HAC} = X = \frac{n_{HAC,0} - n_{HAC}}{n_{HAC,0}} \quad (35)$$

Si

$$n_{HAC,0} = 1,0 \text{ mol}$$

Se simplifica a:

$$X_{HAC} = X = \frac{1 - n_{HAC}}{1} = 1 - n_{HAC} \quad (36)$$



## **4.6 Análisis y procesamiento de datos**

Estratégicamente se deberá elaborar un plan para obtener resultados confiables, para ello se emplearán el software de excel y minitab en forma de gráficas y tablas.

### **4.6.1 Muestra y tratamiento**

- ✓ Tabla de diseño experimental
- ✓ Media
- ✓ Cociente de varianza

### **4.6.2 Datos del desarrollo del trabajo de investigación**

- ✓ Gráficas de dispersión
- ✓ Coeficiente de correlación
- ✓ Minitab
- ✓ Excel

### **4.6.3 Análisis estadísticos**

- ✓ Recta de regresión de mínimos cuadrados
- ✓ Regresión lineal
- ✓ Gráficos y tablas estadísticas

### **4.6.4 Identificación de variables y niveles**

Para el desarrollo de las pruebas experimentales las variables independientes identificadas y niveles se muestran en la **tabla 7** y la influencia de la conversión se ha estudiado mediante la combinación de las variables independientes a tres niveles.

**Tabla 7***Variables Independientes y niveles de experimentación*

N°	Variables	Nivel Bajo	Nivel Intermedio	Nivel Alto
1	Relación de moles de reactantes	1:1	1:2	2:1
2	Concentración catalizada (% porcentaje en peso)	1,5%	3%	5%
3	Temperatura (Celsius)	60°C	70°C	80°C
4	Velocidad de Agitación (revoluciones por minuto)	400 RPM	500 RPM	600 RPM

**Fuente:** Elaboración propia**Método de diseño Taguchi**

El arreglo octogonal aplicado es  $L9(3)^4 = 9$  corridas, y las corridas se realizaron por duplicado.

Donde:

**N° niveles: 3**

**N° factores: 4**

**Figura 8**

*Arreglo del diseño de Taguchi para 3 niveles y 4 factores*

Corrida	Factores			
	A	B	C	D
C1	1	1	1	1
C2	1	2	1	2
C3	1	3	2	3
C4	2	1	1	3
C5	2	2	2	1
C6	2	3	1	2
C7	3	1	2	2
C8	3	2	1	3
C9	3	3	1	1

**Fuente:** Adaptado de "Catálogo de Minitab – [www.support.minitab.com](http://www.support.minitab.com)"

**Tabla 8***Cuadro detallado de experiencias*

<b>N° Experiencias</b>	<b>Relación de moles de reactantes</b>	<b>Catalizador (%w/w)</b>	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Agitación (RPM)</b>
1	1:1	1,5	60	400
2	1:1	3	70	500
3	1:1	5	80	600
4	1:2	1,5	70	600
5	1:2	3	80	400
6	1:2	5	60	500
7	2:1	1,5	80	500
8	2:1	3	60	600
9	2:1	5	70	400

**Fuente:** Elaboración propia

Descripción breve del número de experiencias a realizar, también cabe resaltar que las experiencias se realizaron por duplicado.

“Modelo Taguchi- minitab”

## V. RESULTADOS

### 5.1 Resultados descriptivos

#### 5.1.1 Desarrollo de corridas experimentales

Para obtener el grado de conversión de la síntesis de acetato de isopropilo se realizó el desarrollo de cuadro detallado de experiencias (**ver tabla 8**), mostrando a continuación los resultados de las primeras 9 experiencias.

**Tabla 9**

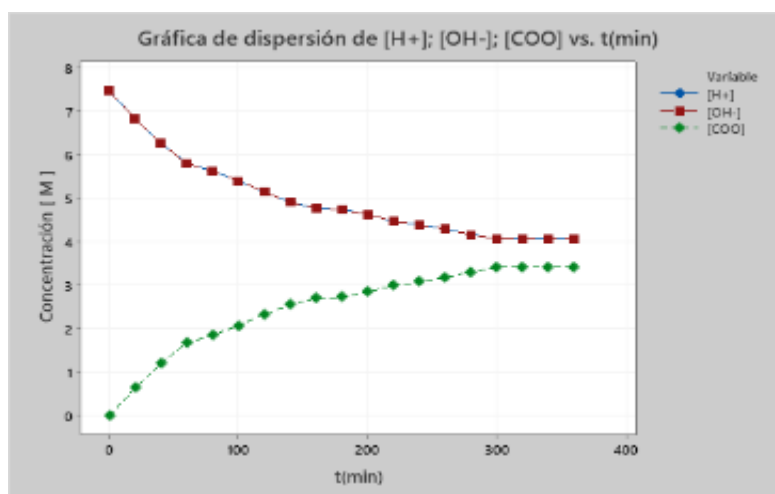
*Experiencia 1: Resultados experimentales para el equilibrio termodinámico*

Temperatura: 60°C, Catalizador :1.5%, Relación (Ac/OH): 1:1, RPM:400					
T(min)	CH <sub>3</sub> COOH (Molar)	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O (Molar)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub> (Molar)	H <sub>2</sub> O (Molar)	X <sub>A</sub>
0	7.48	7.48	0.00	0.00	0.00
15	5.94	5.93	1.54	1.54	0.21
30	5.30	5.29	2.18	2.18	0.30
45	5.05	5.04	2.43	2.43	0.33
60	4.97	4.96	2.51	2.51	0.34
90	4.67	4.66	2.81	2.81	0.38
120	4.48	4.47	3.00	3.00	0.40
150	4.21	4.20	3.27	3.27	0.44
180	4.10	4.09	3.38	3.38	0.45
210	4.01	4.01	3.47	3.47	0.46
240	3.89	3.88	3.59	3.59	0.48
270	3.78	3.78	3.70	3.70	0.49
300	3.78	3.78	3.70	3.70	0.50
330	3.78	3.78	3.70	3.70	0.50
360	3.78	3.78	3.70	3.70	0.50

**Fuente:** Elaboración propia

## Figura 9

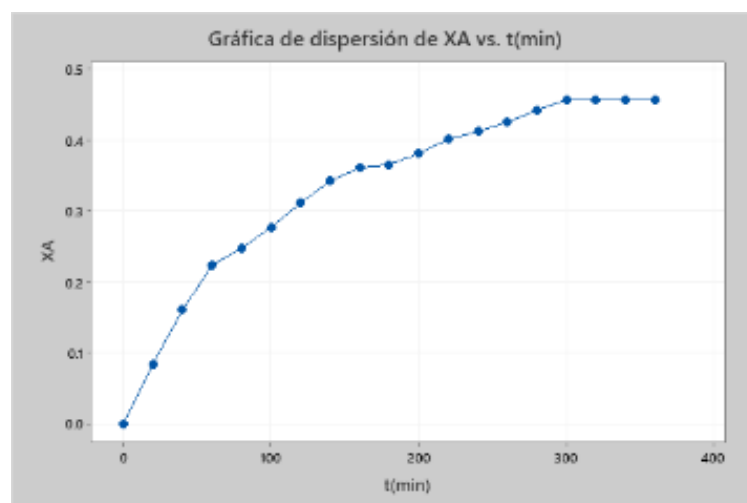
Experiencia 1, Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min)



Fuente: Elaboración propia

## Figura 10

Experiencia 1, Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min)



Fuente: Elaboración propia

**Tabla 10***Experiencia 2: Resultados experimentales para el equilibrio termodinámico*

---

Temperatura: 70°C, Catalizador :3%, Relación (Ac/OH): 1:1, RPM:500

---

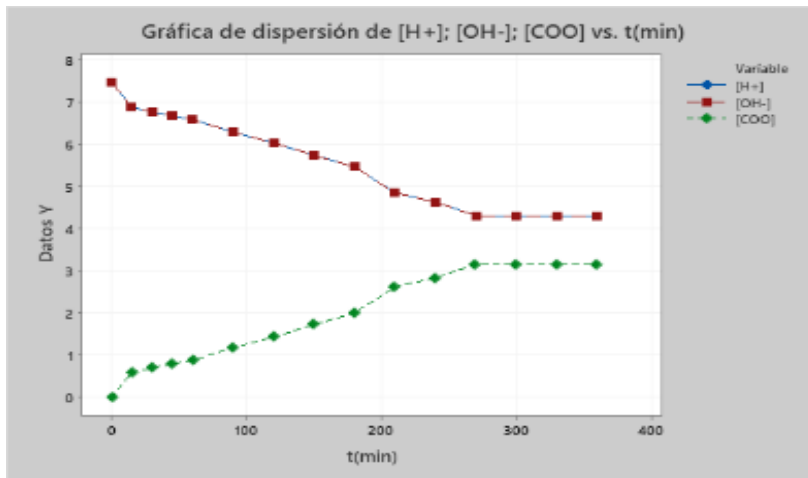
T(min)	CH <sub>3</sub> COOH (Molar)	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O (Molar)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub> (Molar)	H <sub>2</sub> O (Molar)	X <sub>A</sub>
0	7.48	7.48	0.00	0.00	0.00
15	6.89	6.89	0.59	0.59	0.08
30	6.79	6.79	0.69	0.69	0.09
45	6.69	6.69	0.79	0.79	0.11
60	6.60	6.60	0.88	0.88	0.12
90	6.30	6.30	1.18	1.18	0.16
120	6.05	6.05	1.43	1.43	0.19
150	5.75	5.75	1.73	1.73	0.23
180	5.48	5.48	2.00	2.00	0.27
210	4.86	4.86	2.62	2.62	0.35
240	4.64	4.64	2.84	2.84	0.38
270	4.32	4.32	3.16	3.16	0.42
300	4.32	4.32	3.16	3.16	0.42
330	4.32	4.32	3.16	3.16	0.42
360	4.32	4.32	3.16	3.16	0.42

---

**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 11**

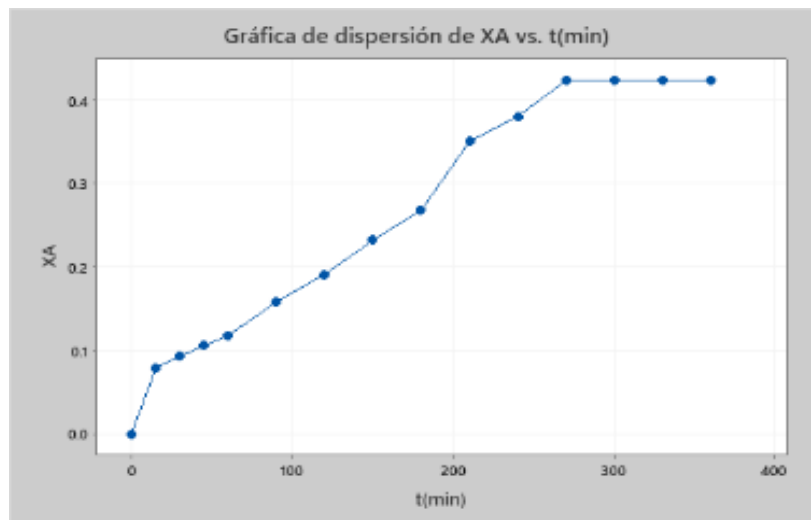
*Experiencia 2, Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 12**

*Experiencia 2, Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Tabla 11***Experiencia 3: Resultados experimentales para el equilibrio termodinámico*

---

Temperatura: 80°C, Catalizador :5%, Relación (Ac/OH): 1:1, RPM:600

---

<b>T(min)</b>	<b>CH<sub>3</sub>COOH (Molar)</b>	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>O (Molar)</b>	<b>C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub> (Molar)</b>	<b>H<sub>2</sub>O (Molar)</b>	<b>X<sub>A</sub></b>
0	7.48	7.48	0.00	0.00	0.00
15	6.69	6.69	0.79	0.79	0.11
30	6.38	6.38	1.10	1.10	0.15
45	6.16	6.16	1.32	1.32	0.18
60	5.75	5.75	1.73	1.73	0.23
90	5.34	5.34	2.14	2.14	0.29
120	4.99	4.99	2.49	2.49	0.33
150	4.75	4.75	2.73	2.73	0.37
180	4.51	4.51	2.97	2.97	0.40
210	4.33	4.33	3.15	3.15	0.42
240	4.27	4.27	3.21	3.21	0.43
270	4.15	4.15	3.33	3.33	0.45
300	4.08	4.08	3.40	3.40	0.45
330	4.08	4.08	3.40	3.40	0.45
360	4.08	4.08	3.40	3.40	0.45

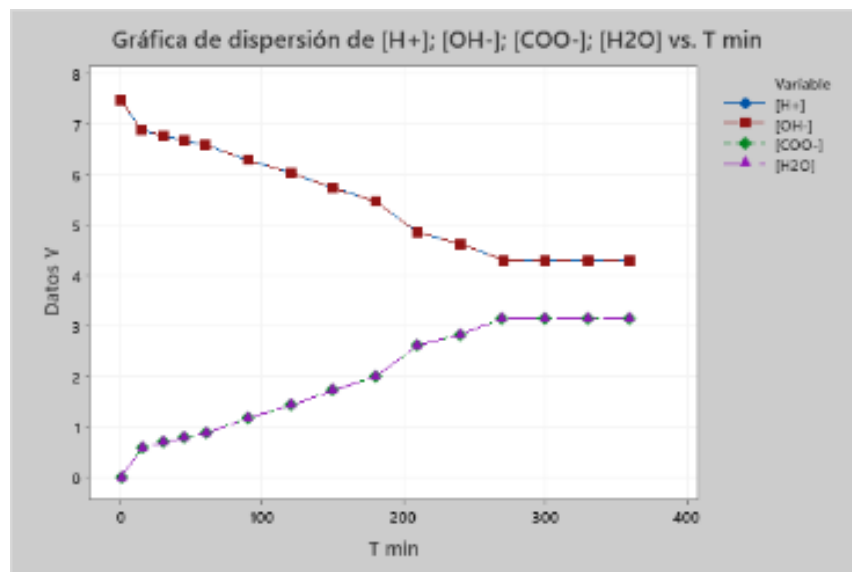
---

**Fuente:** Elaboración propia



**Figura 13**

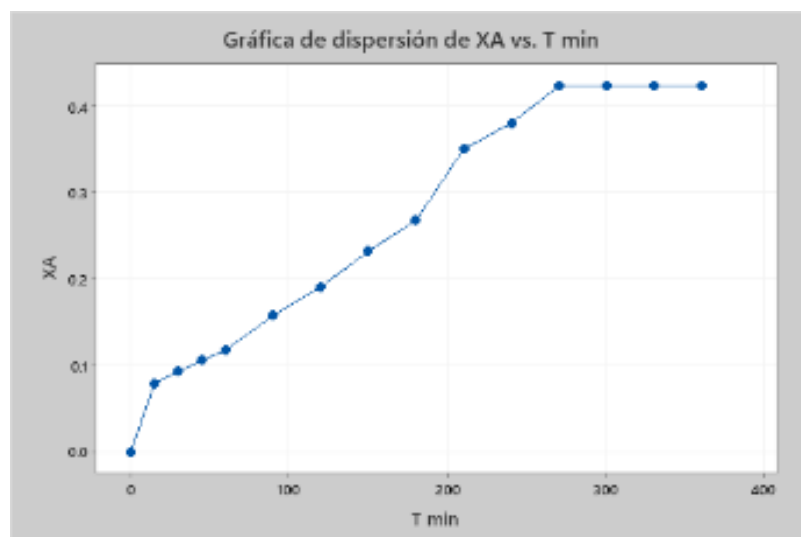
*Experiencia 3, Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 14**

*Experiencia 3, Grado de conversión (X<sub>A</sub>) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Tabla 12**

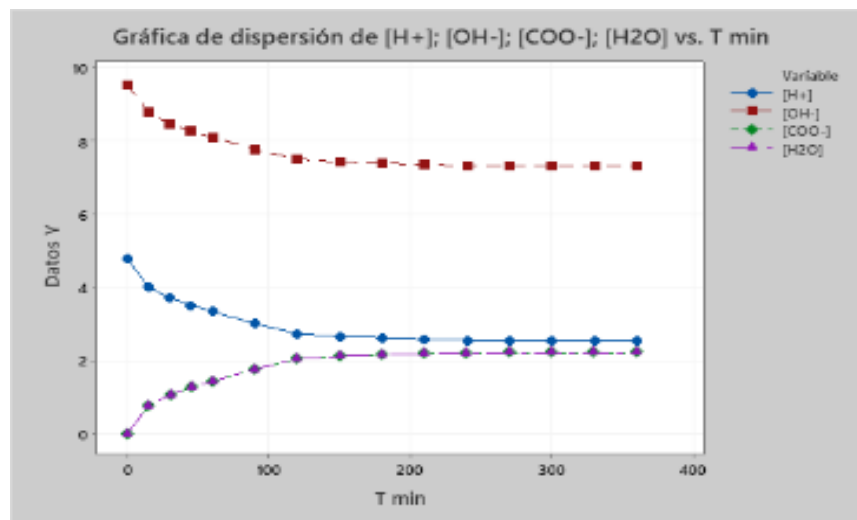
*Experiencia 4: Resultados experimentales para el equilibrio termodinámico*

Temperatura: 70°C, Catalizador :1.5%, Relación (Ac/OH): 1:2, RPM:600					
T(min)	CH <sub>3</sub> COOH (Molar)	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O (Molar)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub> (Molar)	H <sub>2</sub> O (Molar)	X <sub>A</sub>
0	4.76	9.52	0.00	0.00	0.00
15	3.98	8.74	0.78	0.78	0.16
30	3.85	8.61	0.91	0.91	0.19
45	3.65	8.41	1.11	1.11	0.23
60	3.45	8.21	1.31	1.31	0.28
90	3.35	8.11	1.41	1.41	0.30
120	3.21	7.97	1.55	1.55	0.33
150	3.05	7.81	1.71	1.71	0.36
180	2.95	7.71	1.81	1.81	0.38
210	2.85	7.61	1.91	1.91	0.40
240	2.75	7.51	2.01	2.01	0.42
270	2.65	7.41	2.11	2.11	0.44
300	2.54	7.30	2.22	2.22	0.47
330	2.53	7.29	2.23	2.23	0.47
360	2.53	7.28	2.23	2.23	0.47

**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 15**

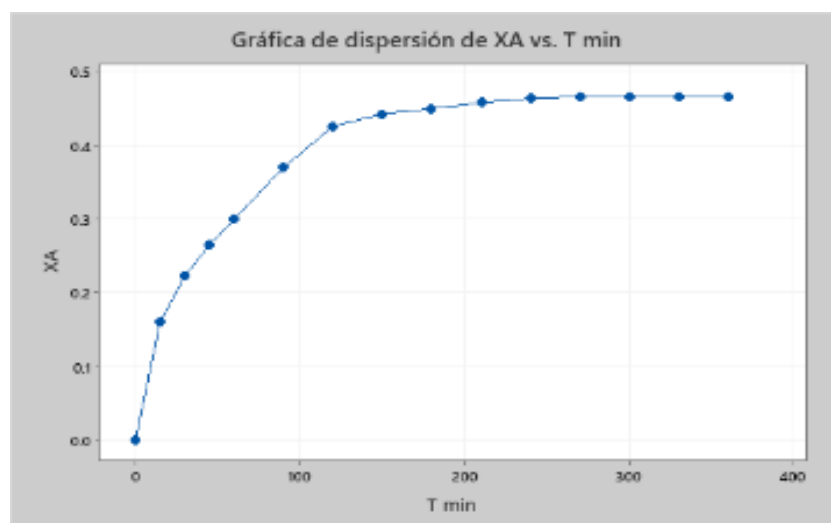
*Experiencia 4, Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 16**

*Experiencia 4, Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Tabla 13**

*Experiencia 5: Resultados experimentales para el equilibrio termodinámico*

---

Temperatura: 70°C, Catalizador :1.5%, Relación (Ac/OH): 1:2, RPM:400

---

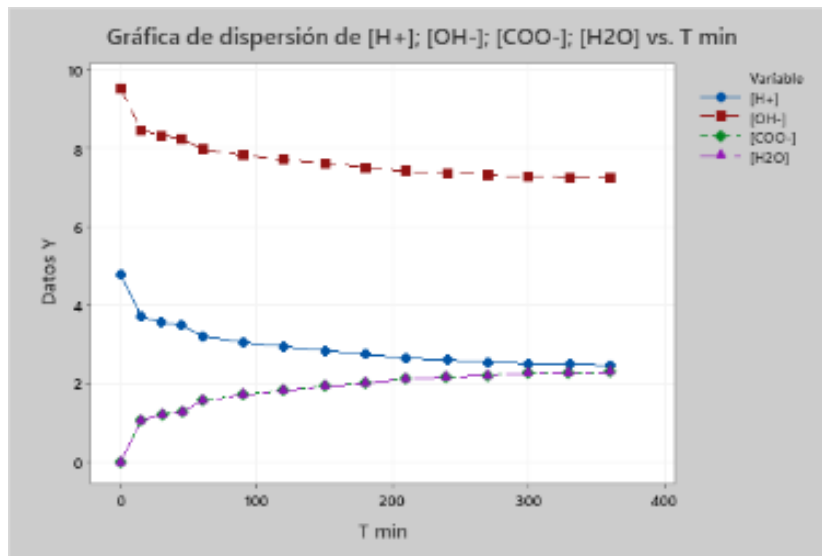
<b>T(min)</b>	<b>CH<sub>3</sub>COOH (Molar)</b>	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>O (Molar)</b>	<b>C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub> (Molar)</b>	<b>H<sub>2</sub>O (Molar)</b>	<b>X<sub>A</sub></b>
0	4.76	9.52	0.00	0.00	0.00
15	3.70	8.46	1.06	1.06	0.22
30	3.55	8.31	1.21	1.21	0.25
45	3.48	8.24	1.28	1.28	0.27
60	3.20	7.96	1.56	1.56	0.33
90	3.05	7.81	1.71	1.71	0.36
120	2.94	7.70	1.82	1.82	0.38
150	2.84	7.60	1.92	1.92	0.40
180	2.75	7.51	2.01	2.01	0.42
210	2.64	7.40	2.12	2.12	0.45
240	2.60	7.36	2.16	2.16	0.45
270	2.55	7.31	2.21	2.21	0.46
300	2.50	7.26	2.26	2.26	0.47
330	2.49	7.25	2.27	2.27	0.48
360	2.47	7.23	2.29	2.29	0.48

---

**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 17**

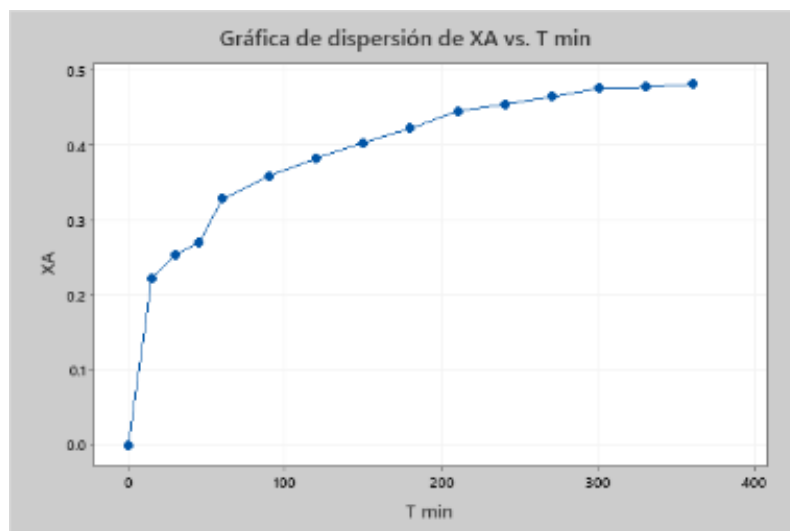
*Experiencia 5, Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min)*



Fuente: Elaboración propia

**Figura 18**

*Experiencia 5, Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min)*



Fuente: Elaboración propia

**Tabla 14***Experiencia 6: Resultados experimentales para el equilibrio termodinámico*

---

Temperatura: 60°C, Catalizador :3%, Relación (Ac/OH): 1:2, RPM:500

---

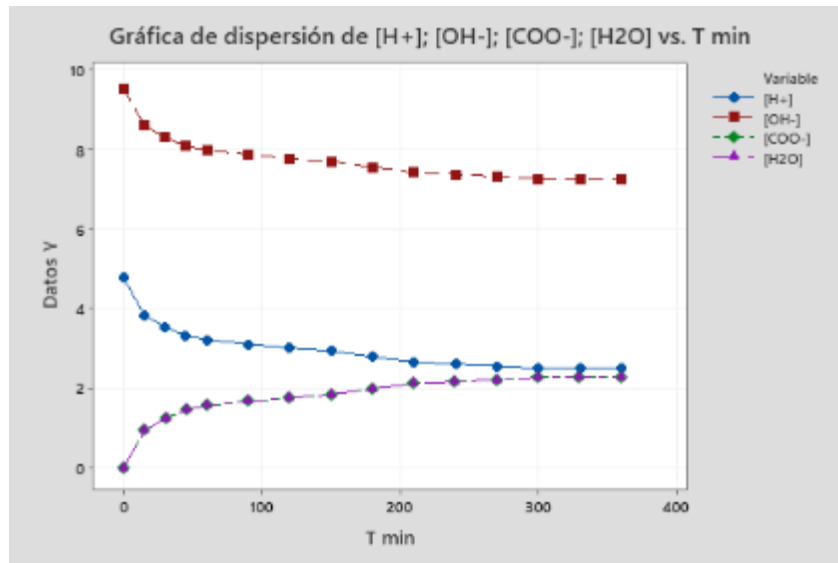
<b>T(min)</b>	<b>CH<sub>3</sub>COOH (Molar)</b>	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>O (Molar)</b>	<b>C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub> (Molar)</b>	<b>H<sub>2</sub>O (Molar)</b>	<b>X<sub>A</sub></b>
0	4.76	9.52	0.00	0.00	0.00
15	3.83	8.58	0.93	0.93	0.20
30	3.53	8.29	1.23	1.23	0.26
45	3.31	8.07	1.45	1.45	0.30
60	3.21	7.97	1.55	1.55	0.33
90	3.10	7.86	1.66	1.66	0.35
120	3.01	7.76	1.75	1.75	0.37
150	2.93	7.68	1.83	1.83	0.39
180	2.78	7.54	1.98	1.98	0.42
210	2.65	7.41	2.11	2.11	0.44
240	2.60	7.36	2.16	2.16	0.45
270	2.55	7.31	2.21	2.21	0.46
300	2.49	7.25	2.27	2.27	0.48
330	2.49	7.25	2.27	2.27	0.48
360	2.49	7.25	2.27	2.27	0.48

---

**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 19**

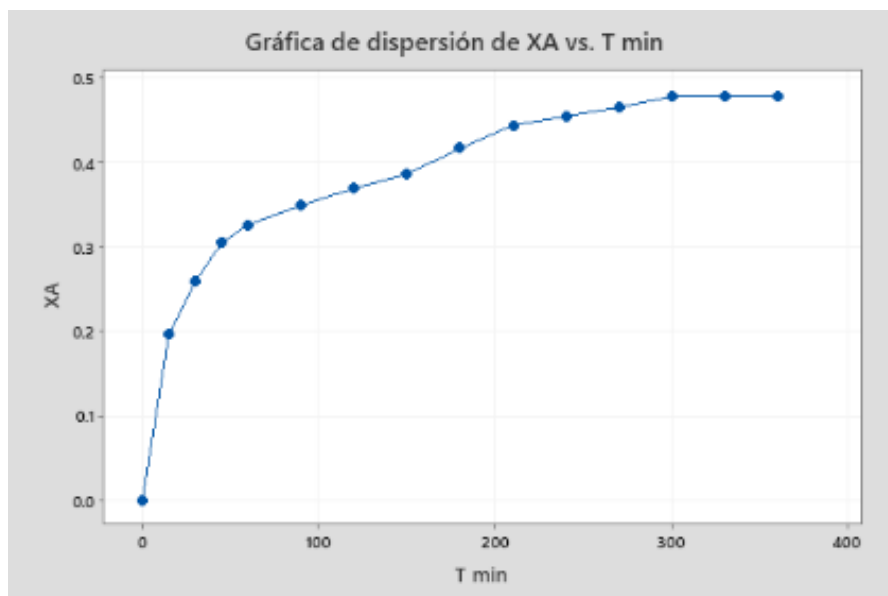
*Experiencia 6, Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min)*



Fuente: Elaboración propia

**Figura 20**

*Experiencia 6, Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min)*



Fuente: Elaboración propia

**Tabla 15***Experiencia 7: Resultados experimentales para el equilibrio termodinámico*

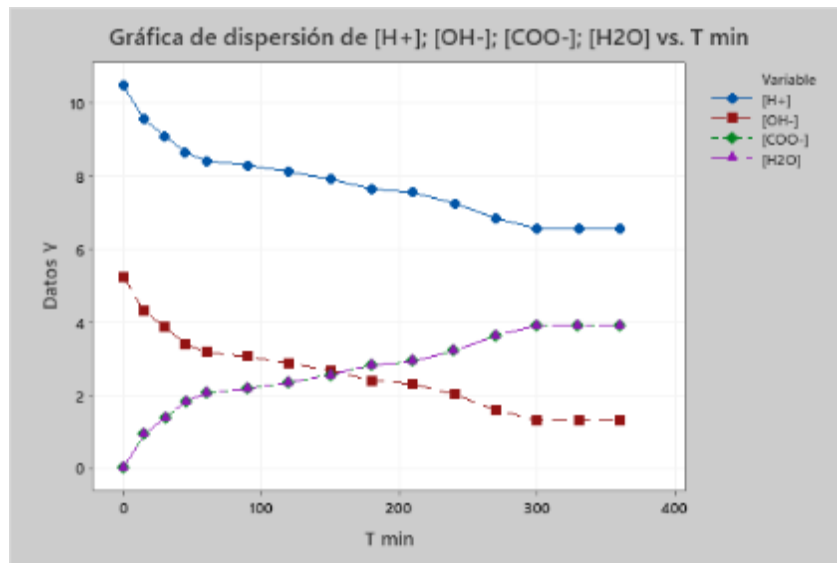
Temperatura: 80°C, Catalizador :1.5%, Relación (Ac/OH): 2:1, RPM:500					
T(min)	CH <sub>3</sub> COOH (Molar)	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O (Molar)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub> (Molar)	H <sub>2</sub> O (Molar)	X <sub>A</sub>
0	10.48	5.24	0.00	0.00	0.00
15	9.55	4.31	0.93	0.93	0.09
30	9.10	3.86	1.38	1.38	0.13
45	8.65	3.41	1.83	1.83	0.17
60	8.42	3.18	2.06	2.06	0.20
90	8.30	3.06	2.18	2.18	0.21
120	8.12	2.88	2.36	2.36	0.23
150	7.92	2.68	2.56	2.56	0.24
180	7.65	2.41	2.83	2.83	0.27
210	7.55	2.31	2.93	2.93	0.28
240	7.26	2.02	3.22	3.22	0.31
270	6.85	1.61	3.63	3.63	0.35
300	6.56	1.32	3.92	3.92	0.37
330	6.56	1.32	3.92	3.92	0.37
360	6.56	1.32	3.92	3.92	0.37

**Fuente:** Elaboración propia



**Figura 21**

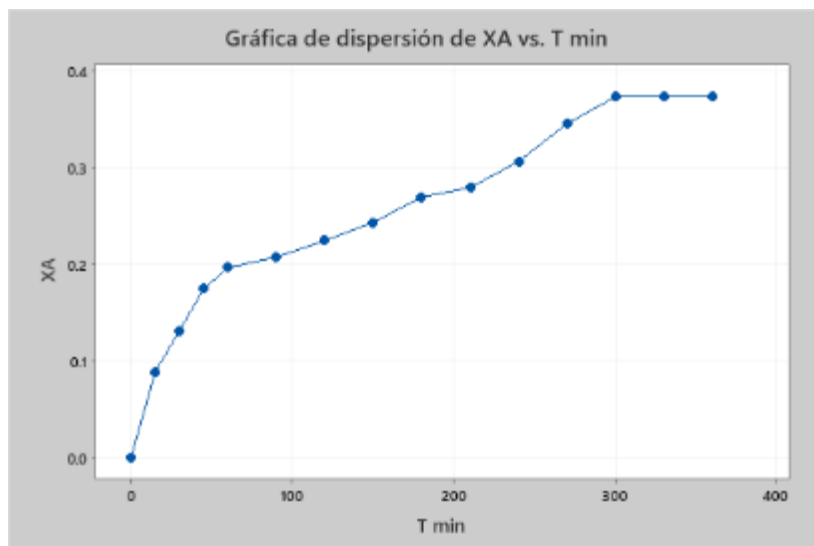
*Experiencia 7, Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 22**

*Experiencia 7, Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Tabla 16***Experiencia 8: Resultados experimentales para el equilibrio termodinámico*

---

Temperatura: 60°C, Catalizador :3%, Relación (Ac/OH): 1:2, RPM:500

---

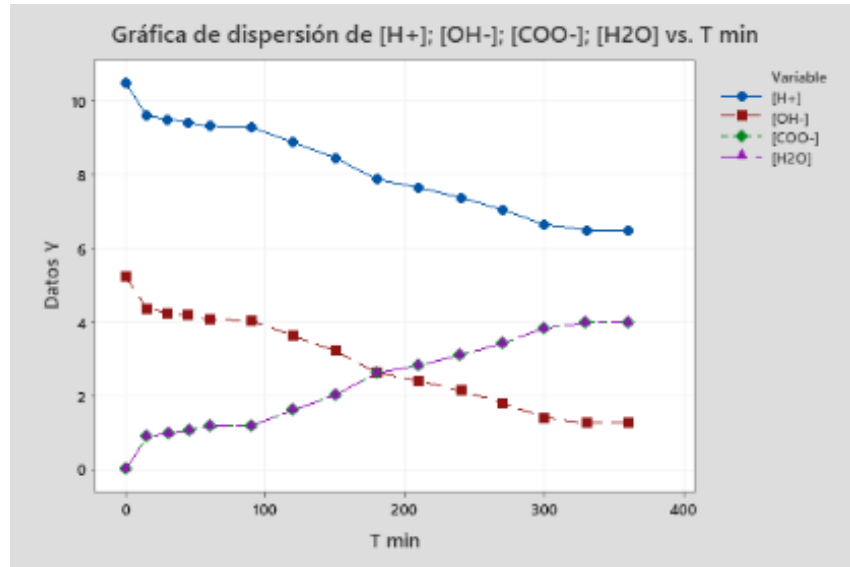
<b>T(min)</b>	<b>CH<sub>3</sub>COOH (Molar)</b>	<b>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>O (Molar)</b>	<b>C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub> (Molar)</b>	<b>H<sub>2</sub>O (Molar)</b>	<b>X<sub>A</sub></b>
0	10.48	5.24	0.00	0.00	0.00
15	9.60	4.36	0.88	0.88	0.08
30	9.50	4.26	0.98	0.98	0.09
45	9.42	4.18	1.06	1.06	0.10
60	9.31	4.07	1.17	1.17	0.11
90	9.29	4.05	1.19	1.19	0.11
120	8.87	3.63	1.61	1.61	0.15
150	8.46	3.22	2.02	2.02	0.19
180	7.87	2.63	2.61	2.61	0.25
210	7.65	2.41	2.83	2.83	0.27
240	7.38	2.14	3.10	3.10	0.30
270	7.05	1.81	3.43	3.43	0.33
300	6.65	1.41	3.83	3.83	0.37
330	6.50	1.26	3.98	3.98	0.38
360	6.50	1.26	3.98	3.98	0.38

---

**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 23**

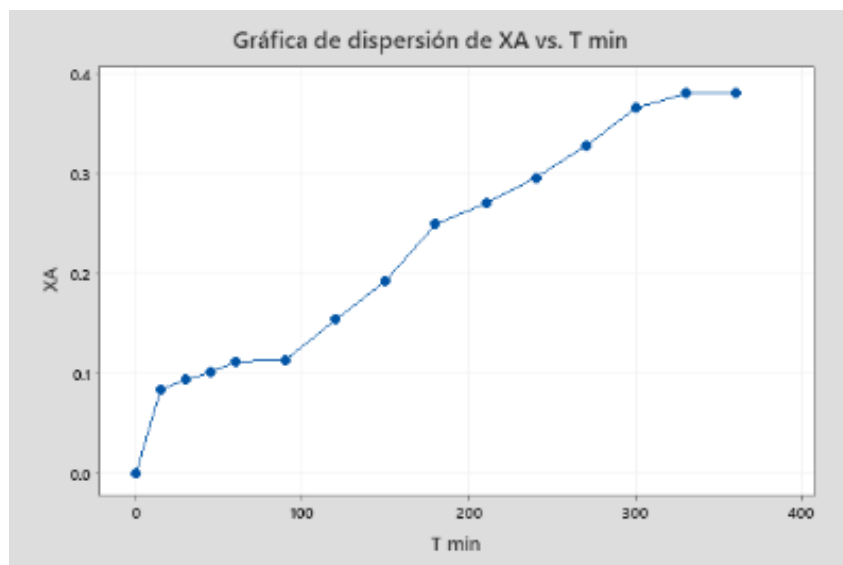
*Experiencia 8, Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 24**

*Experiencia 8, Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

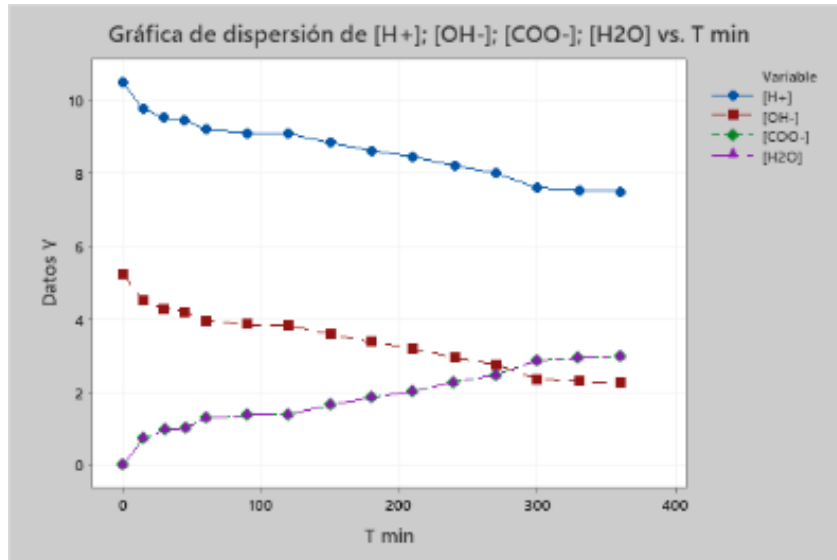
**Tabla 17***Experiencia 9: Resultados experimentales para el equilibrio termodinámico*

Temperatura: 70°C, Catalizador :5%, Relación (Ac/OH): 2:1, RPM:400					
T(min)	CH <sub>3</sub> COOH (Molar)	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O (Molar)	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub> (Molar)	H <sub>2</sub> O (Molar)	X <sub>A</sub>
0	10.48	5.24	0.00	0.00	0.00
15	9.75	4.51	0.73	0.73	0.07
30	9.52	4.28	0.96	0.96	0.09
45	9.45	4.21	1.03	1.03	0.10
60	9.20	3.96	1.28	1.28	0.12
90	9.10	3.86	1.38	1.38	0.13
120	9.08	3.84	1.40	1.40	0.13
150	8.83	3.59	1.65	1.65	0.16
180	8.62	3.38	1.86	1.86	0.18
210	8.45	3.21	2.03	2.03	0.19
240	8.20	2.96	2.28	2.28	0.22
270	8.00	2.76	2.48	2.48	0.24
300	7.60	2.36	2.88	2.88	0.27
330	7.54	2.30	2.94	2.94	0.28
360	7.50	2.26	2.98	2.98	0.28

**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 25**

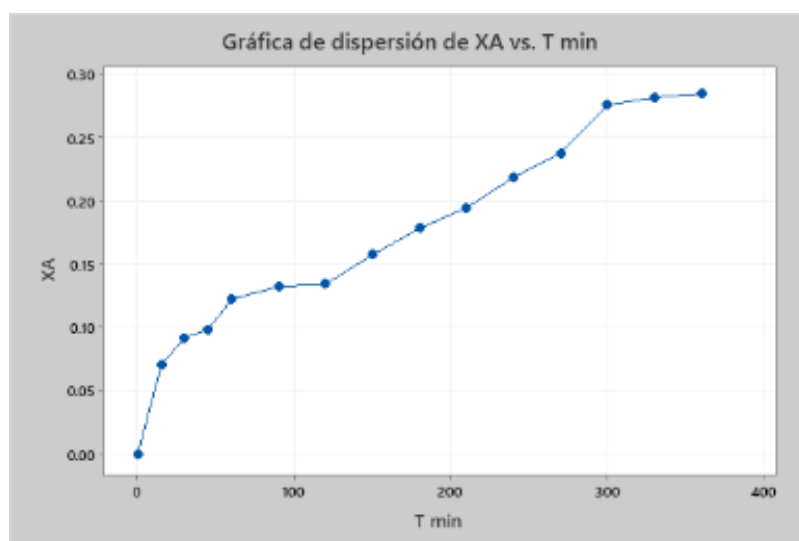
*Experiencia 9, Concentraciones (mol/L) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 26**

*Experiencia 9, Grado de conversión ( $X_A$ ) vs Tiempo (min)*



**Fuente:** Elaboración propia

### 5.1.2 Determinación de las constantes de velocidad y la ecuación cinética

Para la determinación de las constantes de velocidad se utilizó la ecuación 9 (ver página 29) relacionando los valores óptimos de conversión obtenidos a las temperaturas de 60°C, 70°C y 80°C.

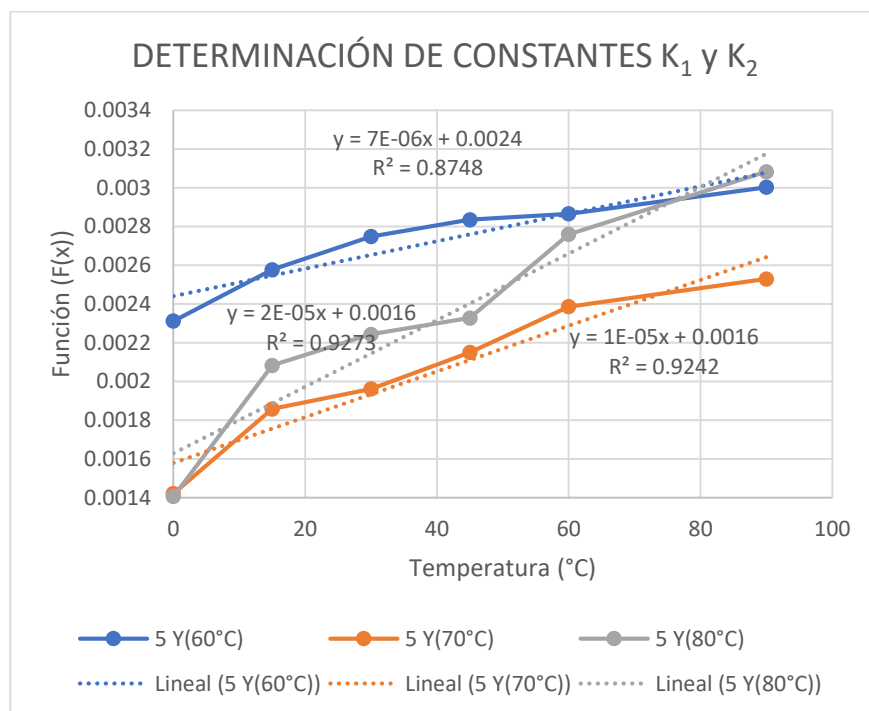
**Tabla 18**

*Datos experimentales para hallar la constante de velocidad*

T min	Y=F(X) 60°C x10 <sup>-3</sup>	Y=F(X) 70°C x10 <sup>-3</sup>	Y=F(X) 80°C x10 <sup>-3</sup>
0	0.0023	0.0014	0.0014
15	0.0026	0.0019	0.0021
30	0.0027	0.0020	0.0022
45	0.0028	0.0022	0.0023
60	0.0029	0.0024	0.0028
90	0.0030	0.0025	0.0031
120	0.0031	0.0028	0.0034
150	0.0033	0.0031	0.0038
180	0.0035	0.0034	0.0042
210	0.0036	0.0038	0.0050
240	0.0038	0.0043	0.0054
270	0.0043	0.0052	0.0062
300	0.0043	0.0085	0.0079
330	0.0043	0.0103	0.0086

**Fuente:** Elaboración propia

Se eligió los valores óptimos de las experiencias 1,4 y 5 debido a su alto desempeño con respecto al grado de conversión obtenido.

**Figura 27***Datos experimentales para hallar las constantes de velocidad***Fuente:** Elaboración propia

En la **figura 27**, se observa el resultado de conversión  $X_A$  de las experiencias 1, 4 y 5 reemplazadas en la ecuación 9 con respecto a la temperatura de cada experiencia, obteniendo por regresión lineal nuestras pendientes “m” que nos permitirá determinar la constante cinética.

**Tabla 19***Valores determinados de la regresión lineal simple*

Temperatura °C	Pendiente “m” (L/mol.t) $\times 10^{-3}$	B	$CA_0$ (Mol/L)
60	7.09823E-06	2.44E-03	7.48212
70	1.1819E-05	0.002269319	4.75938
80	1.71963E-05	0.001629567	4.75967

**Fuente:** Elaboración propia

Utilizamos la ecuación 11 (ver página 29) para reemplazar los valores de las pendientes obtenidas en la regresión de las gráficas con las respectivas temperaturas y sus CA<sub>0</sub> de cada experiencia.

$$k_1 = \frac{m}{CA_0} \times 10^3$$

**Tabla 20**

Valores de la constante cinética ( $k_1$ ) obtenidos a partir de las experiencias más óptimas

T promedio	$k_1$	T (K)	1/T	Ln $k_1$
80	3.61E-03	353.15	0.0028	-12.53
70	2.48E-03	343.15	0.0029	-12.91
60	9.49E-04	333.15	0.0030	-13.87

**Fuente:** Elaboración propia

Adicionalmente se aplicó la ecuación 6 (ver página 31), con la que hallamos la constante cinética  $k_2$ .

$$k_2 = k_1 \cdot \frac{(1 - X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e(\theta_D + X_e)}$$

**Tabla 21**

Valores de la constante cinética ( $k_2$ ) más óptimos

T promedio	$k_1$ óptimo	$\theta_B$	$\theta_D$	$X_e$	$k_2$
80	3.61E-03	0.513	2.22461E-05	0.481	2.59E-04
70	2.48E-03	0.500	2.2478E-05	0.469	1.86E-04
60	9.49E-04	0.999	1.42982E-05	0.495	9.86E-04

**Fuente:** Elaboración propia



Una vez obtenidos los valores de  $k_1$  y  $k_2$  recopilados de las tablas de 18 y 19 respectivamente se procedió a reemplazar en la ecuación de cinética de la reacción (ver tabla 22).

**Tabla 22**

*Expresión cinética de las experiencias más representativas.*

T promedio	Ecuación cinética
80	$\frac{d C_A}{dt} = (3.61 \times 10^{-03}) \cdot C_A \cdot C_B - (2.44 \times 10^{-04}) \cdot C_C \cdot C_D$
70	$\frac{d C_A}{dt} = (2.41 \times 10^{-03}) \cdot C_A \cdot C_B - (1.86 \times 10^{-04}) \cdot C_C \cdot C_D$
60	$\frac{d C_A}{dt} = (9.49 \times 10^{-04}) \cdot C_A \cdot C_B - (9.86 \times 10^{-04}) \cdot C_C \cdot C_D$

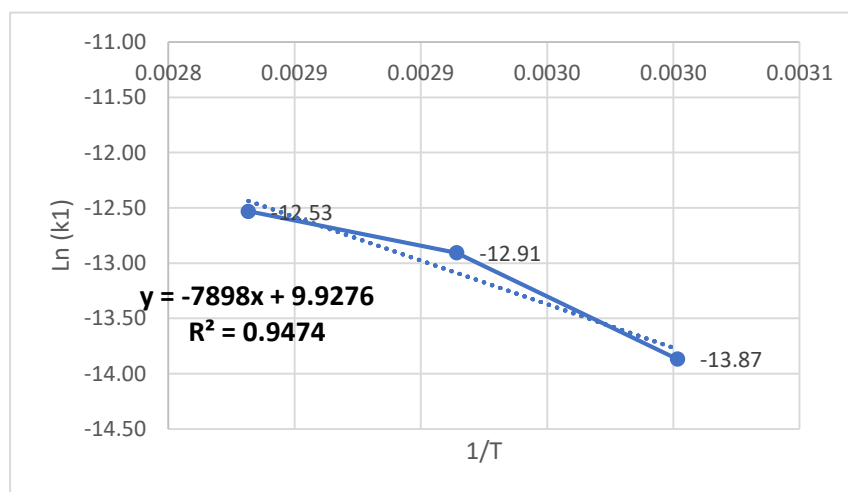
Fuente: Elaboración propia

### 5.1.3 Determinación de la energía de activación ( $E_a$ )

Para determinar la energía de activación se graficaron los valores de  $\ln k_1$  y  $1/T$  pertenecientes a la **tabla 19** para luego realizar una regresión lineal (ver **Figura 28**).

**Figura 28**

*Regresión lineal de  $\ln k_1$  vs  $1/T$*



Fuente: Elaboración propia

Teniendo como resultado de la regresión lineal, se realizó la correlación con la ecuación linealizada de Arrhenius para poder determinar la energía de activación ( $E_a$ ) de la reacción.

$$Y = m(x) + b$$

$$Y = -7898(x) + 9.927$$

$$\ln K = -\frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T} + \ln A \quad (37)$$

Donde  $R = 8.3143 \text{ J / (mol/K)}$  y el factor de frecuencia es:

$$\ln A = 9.927 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$A = \text{Exp} \left( 9.927 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \right) = 20475.82 \text{ J/mol}$$

Se reemplazó en la ecuación lineal de Arrhenius obteniendo una energía de activación de  $E_a = 65\ 666,34 \text{ J/mol}$ , además las unidades de la constante de velocidad determinada son de  $\text{J/mol} = \text{kg.m}^2/\text{s}^2$  siendo esta una constante.

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Finalmente completando la ecuación de Arrhenius.

$$k = (20475.82) e^{-\frac{65\ 666,34}{8.314 \cdot (273.15+T)}} \quad (38)$$

### 5.1.4 Determinación de la entropía, entalpía y energía de Gibbs de la reacción.

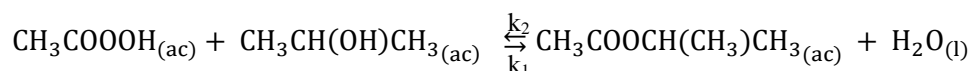
Para el cálculo de la entropía, entalpía y la energía de Gibbs se hará uso de la ecuación 24.

#### Cálculo de entropía estándar de reacción

$$\Delta S_r^0 = \sum nS^0(\text{Productos}) - \sum mS^0(\text{Reactantes})$$

Donde: n y m son los coeficientes estequiométricos de la reacción

Para la reacción en estudio



$$\begin{aligned}\Delta S_r^0 &= 1 \text{ mol CH}_3\text{COOCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3 \left( \frac{486,90\text{J}}{\text{mol K}} \right) + 1 \text{ mol H}_2\text{O} \left( 44,270 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} \right) \\ &\quad - 1 \text{ mol CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3 \left( 318,80 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} \right) \\ &\quad - 1 \text{ mol CH}_3\text{COOOH} \left( 195,03 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} \right) \\ \Delta S_r^0 &= 17,34 \frac{\text{J}}{\text{mol. K}}\end{aligned}$$

#### Cálculo de la entalpía estándar de la reacción

$$\Delta H_r^0 = \sum nH^0(\text{Productos}) - \sum mH^0(\text{Reactantes})$$

$$\begin{aligned}\Delta H_r^0 &= 1 \text{ mol CH}_3\text{COOCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3 \left( 464,80 \frac{\text{KJ}}{\text{mol K}} \right) + 1 \text{ mol H}_2\text{O} \left( 241,3 \frac{\text{KJ}}{\text{mol K}} \right) \\ &\quad - 1 \text{ mol CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3 \left( 257,53 \frac{\text{KJ}}{\text{mol K}} \right) \\ &\quad - 1 \text{ mol CH}_3\text{COOOH} \left( 434,84 \frac{\text{KJ}}{\text{mol K}} \right) \\ \Delta H_r^0 &= 13,73 \frac{\text{KJ}}{\text{mol. K}}\end{aligned}$$

## Cálculo de la energía libre de Gibbs de la reacción

Para la reacción de esterificación

$$\Delta G_r^0 = \sum n \Delta G^0(\text{Productos}) - \sum m \Delta G^0(\text{Reactantes})$$
$$\Delta G_r^0 = 1 \text{ mol CH}_3\text{COOCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3 \left( \frac{320,40\text{KJ}}{\text{mol K}} \right) + 1 \text{ mol H}_2\text{O} \left( \frac{228,60\text{KJ}}{\text{mol K}} \right)$$
$$- 1 \text{ mol CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3 \left( \frac{162,97\text{KJ}}{\text{mol K}} \right)$$
$$- 1 \text{ mol CH}_3\text{COOH} \left( 376,69 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} \right)$$
$$\Delta G_r^0 = 8,94 \text{ KJ/K}$$

Reemplazando los valores obtenidos  $\Delta H_r^0$  y  $\Delta S_r^0$

$$\ln(K_{\text{eq}}) = \frac{\Delta S^0}{R} - \frac{\Delta H^0}{R} \frac{1}{T}$$
$$\ln(K_{\text{eq}}) = \frac{17,34}{8,314} - \left( \frac{13\,730 \text{ J}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}} \right) \frac{1}{T} = 2,08 - \frac{1651,43}{T}$$
$$\ln(K_{\text{eq}}) = 2,08 - \frac{1651,43}{T}$$

Con este modelo matemático obtenido se puede encontrar una relación entre el comportamiento de la constante de equilibrio con respecto a la temperatura de la reacción de esterificación.

Se realizó la siguiente tabulación de la función obtenida.

**Tabla 23**

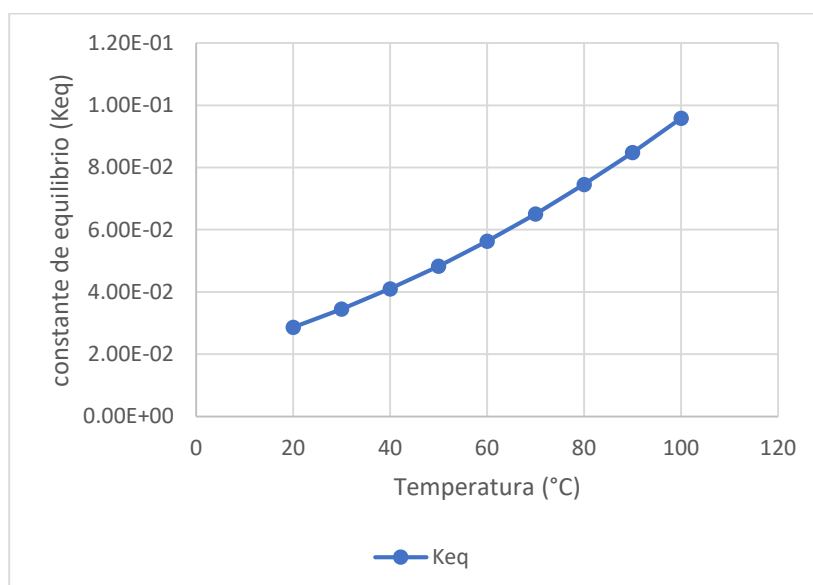
*Valores de la constante de equilibrio en función a la temperatura*

T °C	Kelvin (K)	F(x)	K <sub>eq</sub>
20	293.15	-3.553	2.86E-02
30	303.15	-3.367	3.45E-02
40	313.15	-3.193	4.10E-02
50	323.15	-3.030	4.83E-02
60	333.15	-2.877	5.63E-02
70	343.15	-2.732	6.51E-02
80	353.15	-2.596	7.46E-02
90	363.15	-2.467	8.48E-02
100	373.15	-2.345	9.58E-02

**Fuente:** Elaboración propia

**Figura 29**

*Constante de equilibrio en función a la temperatura*



**Fuente:** Elaboración propia

## 5.2 Resultados inferenciales

Según el modelo de investigación no amerita, porque se está trabajando con datos reales.

## 5.3 Otros resultados estadísticos

### Resumen de corridas experimentales

En la tabla 24. Se observa el resumen de los resultados obtenidos en cada corrida a nivel de laboratorio además se muestra las conversiones de las 18 corridas realizadas incluyendo duplicados.

**Tabla 24**

*Datos experimentales a nivel de laboratorio*

N°	Relación	Catalizador	Temperatura	Agitación	$X_A$	$X_A''$
	[A]/[B]	w/w %	°C	RPM		
1	1:1	1.5	60	400	0.50	0.49
2	1:1	3	70	500	0.42	0.43
3	1:1	5	80	600	0.46	0.46
4	1:2	1.5	70	600	0.47	0.47
5	1:2	3	80	400	0.48	0.48
6	1:2	5	60	500	0.48	0.48
7	2:1	1.5	80	500	0.37	0.35
8	2:1	3	60	600	0.38	0.31
9	2:1	5	70	400	0.29	0.31

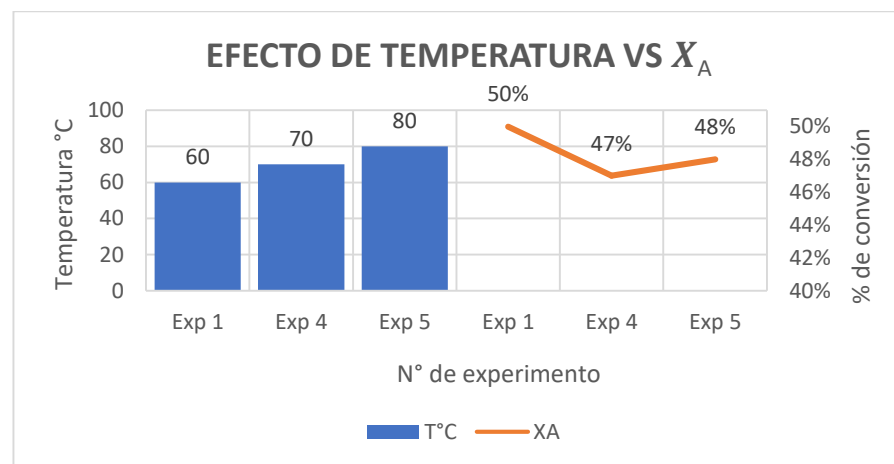
**Fuente:** Elaboración propia

### 5.3.1 Efecto de la temperatura de reacción

De la figura 30, se observa el efecto de la temperatura con respecto al grado de conversión obtenido en las experiencias 1, 4 y 5, las cuales fueron realizadas a diferentes temperaturas (60,70 y 80°C). Además, se observó que la tendencia mostrada en los datos experimentales a una temperatura de 60 °C fue la mejor.

**Figura 30**

*Efecto de temperatura vs grado de conversión*



Se debe considerar que el comportamiento de las experiencias 1,4 y 5 no solo dependen de la temperatura, sino también de otras variables distribuidas de manera aleatoria según el diseño experimental elegido.

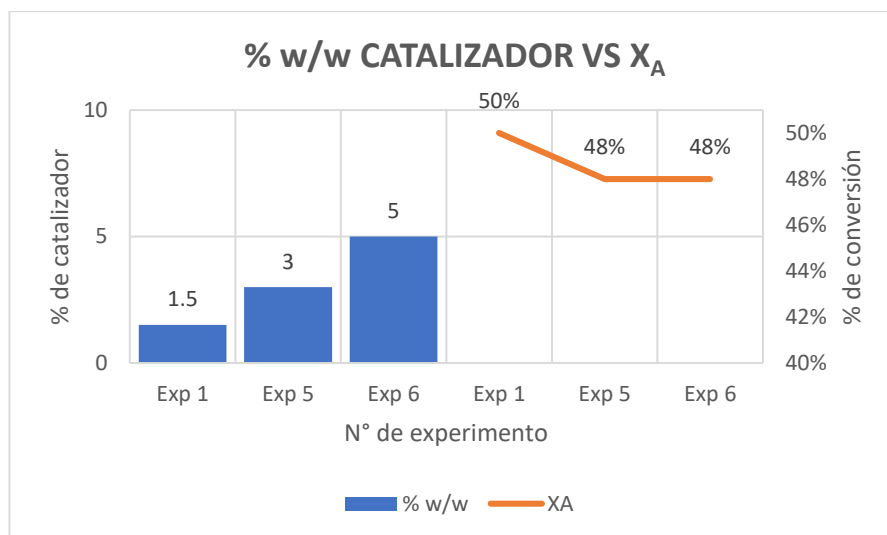
### 5.3.2 Efecto %w/w del catalizador

De la figura 31, se observa una relación inversamente proporcional del efecto del % w/w catalizador con respecto al grado de conversión obtenido en las experiencias 1, 5 y 6, las cuales fueron realizadas a diferentes

concentraciones (1.5% ,3% y 5%). También se obtuvo un mejor grado de conversión utilizando la formulación de 1% en peso de Catalizador sólido.

**Figura 31**

*Efecto %w/w del catalizador*



Para este caso tenemos que el comportamiento del catalizador con respecto al grado de conversión es inversamente proporcional y pierde su efectividad conforme se continúe adicionando catalizador, esto se debe a que nuestro reactor se mantiene en un volumen constante y los sitios activos de la resina aplicable necesita de una mayor área para que sea efectiva.

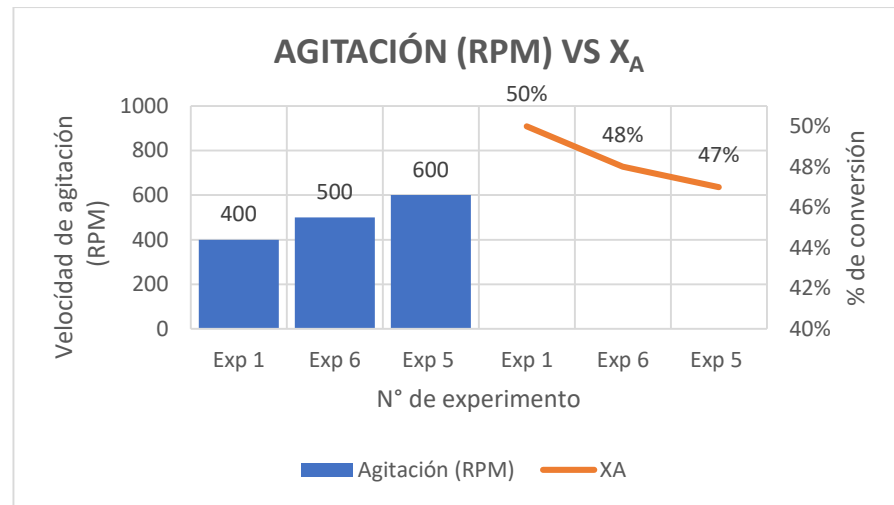
### 5.3.3 Efecto de la velocidad de agitación en la reacción

De la figura 32, se observa una relación inversamente proporcional del efecto de la velocidad de agitación con respecto al grado de conversión obtenido en las experiencias 4, 6 y 5, las cuales fueron realizadas a diferentes velocidades (400 ,500 y 600 RPM), concluyendo que la mejor velocidad de agitación fue a 400 RPM.



**Figura 32**

*Efecto de la velocidad de agitación (RPM)*



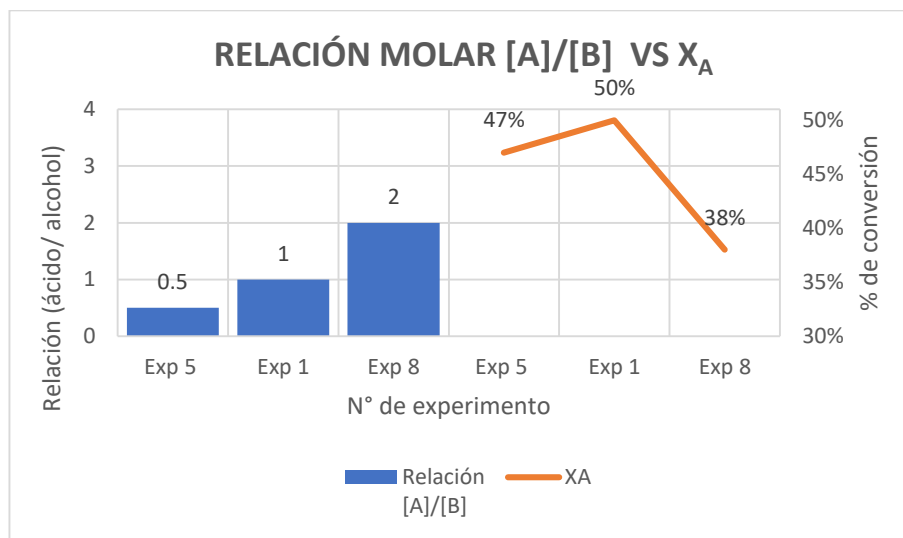
Con respecto al comportamiento de la velocidad de agitación (RPM), se pudo observar que para las experiencias 1, 6 y 5 en relación con el grado de conversión nos muestra que es inversamente proporcional.

#### **5.3.4 Efecto de la relación de ácido y base en la reacción**

De la figura 33, se observa el efecto de la relación de ácido con respecto al grado de conversión obtenido en las experiencias 5, 1 y 8, las cuales fueron realizadas a diferentes relaciones molares respectivamente ( $[A]/[B] = 0.5$ ,  $[A]/[B] = 1$  y  $[A]/[B] = 2$ ), concluyendo que la relación que genera un mayor grado de conversión fue  $[A]/[B] = 1$ .

**Figura 33**

*Relación Molar [A] vs  $X_A$*



Finalmente, de la relación molar entre el reactivo limitante y el reactivo por exceso se observa un comportamiento de mayor equilibrio en la experiencia 1.

## VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

### 6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados

#### Análisis de Probabilidad Residuo de la Media

Primero realizaremos el análisis de probabilidad para validar que los datos que hemos obtenido mediante las diferentes corridas experimentales presenten una distribución normal (ver figura 34).

**Tabla 25**

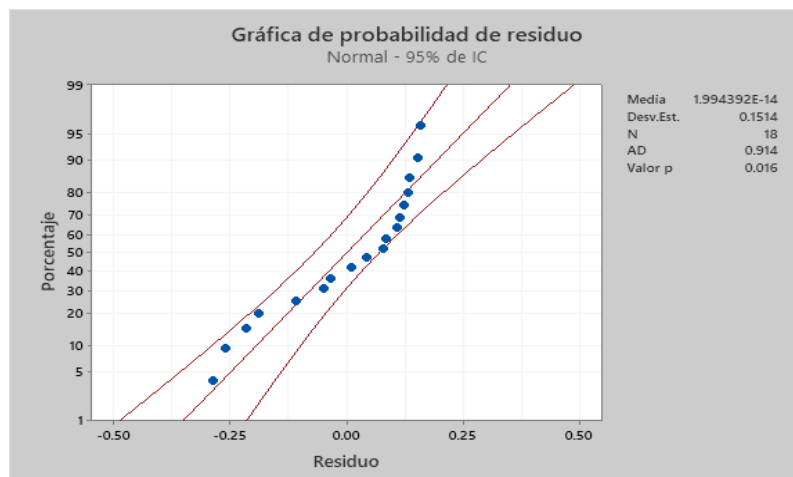
*Los estadísticos descriptivos*

	Media	Desv. Desviación	N
Temperatura	72,110	7,979	18
Catalizador	3,220	1,528	18
Conversión $X_A$	,3417	,15139	18
Velocidad	514,388	86,836	18

**Fuente:** Elaboración propia – Software IBM SPSS Statistics Visor

**Figura 34**

*Normalidad del Residuo de la Media de  $X_A$*



En la figura 34, se observa que el residuo sigue una distribución normal, teniendo un valor de significancia  $p < 0.05$ , por lo tanto, se sugiere realizar el modelo de correlación de *Pearson*, así mismo se tienen más de 2 factores y se debe analizar el resumen de modelo, para saber qué porcentaje de los datos están dentro de nuestro análisis.

**Tabla 26**

*Información del factor Resumen de Modelo*

<b>Factor</b>	<b>Tipo</b>	<b>Niveles</b>	<b>Valores</b>
Catalizador	Fijo	3	1.5; 3.0; 5.0
Temperatura	Fijo	3	60; 70; 80
Agitación	Fijo	3	400; 500; 600
Relación	Fijo	3	1:1; 1:2; 2:1

**Fuente:** Elaboración propia – *Software Minitab 2019*

**Tabla 27**

*Resumen de modelo de regresión*

<b>S</b>	<b>R-cuad.</b>	<b>R-cuad. (ajustado)</b>	<b>R-cuad. (pred)</b>
0.0190292	96.05%	92.53%	84.18%

**Fuente:** Elaboración propia – *Software Minitab 2019*

En la tabla 27 el resultado del R - cuadrado nos quiere decir que el 96.05 % estarán dentro del modelo de correlación planteada, también nuestro R-cuadrado (ajustado) posee un valor de 92.53 %, debido a que el valor de la significancia de algunos factores los cuales tienen la siguiente condición de  $p < 0,05$ .

**Tabla 28**

*Coefficientes de regresión*

<b>Término</b>	<b>Coef</b>	<b>EE del coef.</b>	<b>Valor T</b>	<b>Valor p</b>	<b>FIV</b>
Constante	0.42178	0.00449	94.04	0.000	
Catalizador					
1.5	0.01722	0.00634	2.72	0.024	1.33
3.0	-0.00544	0.00634	-0.86	0.413	1.33
Temperatura					
60	0.01539	0.00634	2.43	0.038	1.33
70	-0.02544	0.00634	-4.01	0.003	1.33
Agitación					
400	0.00189	0.00634	0.30	0.773	1.33
500	-0.00161	0.00634	-0.25	0.805	1.33
Relación					
1:1	0.03572	0.00634	5.63	0.000	1.33
1:2	0.05222	0.00634	8.23	0.000	1.33

**Fuente:** Elaboración propia – *Software Minitab 2019*

También mostramos la ecuación de regresión para cada uno de los factores involucrados en el análisis, esta ecuación se muestra a continuación.

### **Tabla 29**

*Ecuación de regresión*

---

$$X_A = 0.42178 + 0.01722 \text{ Catalizador}_{1.5} - 0.00544 \text{ Catalizador}_{3.0} \\ - 0.01178 \text{ Catalizador}_{5.0} \\ + 0.01539 \text{ Temperatura}_{60} - 0.02544 \text{ Temperatura}_{70} \\ + 0.01006 \text{ Temperatura}_{80} \\ + 0.00189 \text{ Agitación}_{400} - 0.00161 \text{ Agitación}_{500} \\ - 0.00028 \text{ Agitación}_{600} \\ + 0.03572 \text{ Relación}_{1:1} + 0.05222 \text{ Relación}_{1:2} \\ - 0.08794 \text{ Relación}_{2:1}$$

---

### **Contrastación de Hipótesis – Análisis de correlación**

En esta etapa continuamos con el análisis previo, debido a que se obtuvo una distribución normal lo recomendable es aplicar la correlación de **Pearson** para cada uno de los factores para definir si aceptaremos la hipótesis planteada en el punto 4.1.

**Tabla 30***Correlación de Pearson entre parámetros de operación.*

		Conversión			
		Temperatura	Catalizador	X <sub>A</sub>	RPM
Temperatura	Correlación de Pearson	1	-,034	-,580*	-,050
	Sig. (bilateral)		,894	,012	,843
	N	18	18	18	18
Catalizador	Correlación de Pearson	-,034	1	-,022	,113
	Sig. (bilateral)	,894		,932	,656
	N	18	18	18	18
Conversión X <sub>A</sub>	Correlación de Pearson	-,580*	-,022	1	,225
	Sig. (bilateral)	,012	,932		,370
	N	18	18	18	18
Agitación (RPM)	Correlación de Pearson	-,050	,113	,225	1
	Sig. (bilateral)	,843	,656	,370	
	N	18	18	18	18

\*. La correlación es significativa en el nivel 0,05 (bilateral).

**Fuente:** Elaboración propia – *Software IBM SPSS Statistics Visor*

Como se muestra en la tabla 30. El valor de significancia para el parámetro de la temperatura y el grado de conversión X<sub>A</sub> es de 0,012 siendo  $p < 0.05$ , esto quiere decir que al menos uno de los parámetros influye en la obtención de un grado de conversión óptimo igual al 50%, rechazando la Hipótesis Nula N<sub>0</sub>.

Adicionalmente se realizó la correlación de **Spearman**, con el fin de realizar una comparación de los métodos de correlación siendo dando este último *valor de significancia*  $p = 0.05$  para el parámetro de la temperatura y el grado de conversión, siendo mayor que el de la correlación de **Pearson**.

## ANOVA para el Diseño de Taguchi

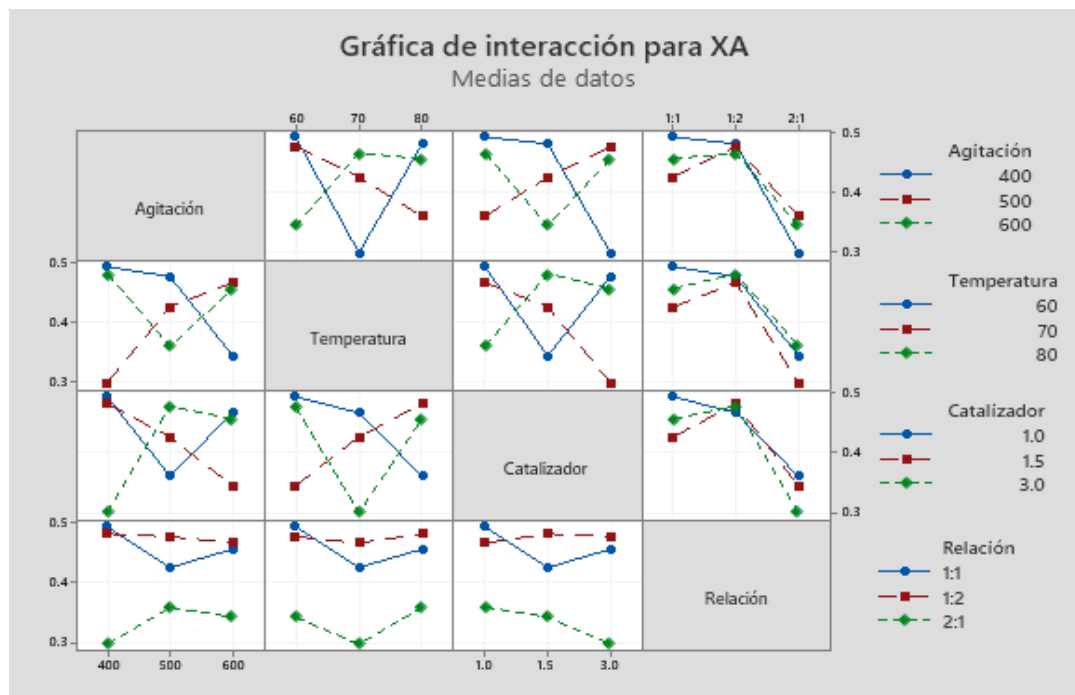
Para ver la influencia de los factores o variables independientes en la variable dependiente o respuesta se hizo en el software de Minitab 2019.

Este estudio también nos permite saber si las variables interactúan entre sí, conociendo la dependencia de una con otra.

### a) Gráfica de interacción entre la variable respuesta y los factores

**Figura 35**

*Interacción entre el grado de conversión  $X_A$*



**Fuente:** Elaboración propia – Software Minitab

En la figura 35. Se observa que se evaluaron todos los factores en relación con el grado de conversión  $X_A$ . En la primera columna se puede observar la interacción entre la agitación vs el grado de conversión  $X_A$ , en la segunda columna podemos ver la interacción entre la temperatura °C vs el grado de conversión  $X_A$ , en la tercera columna vemos la interacción entre el % en peso



del catalizador vs el grado de conversión  $X_A$  y finalmente se observa en la cuarta columna la interacción entre el factor de Relación molar  $[A]/[B]$  vs el grado de conversión  $X_A$ .

## b) Efectos principales del grado de conversión $X_A$

**Tabla 31**

*Resultados para medias*

Nivel	Relación	Catalizador	Temperatura	Agitación
1	0.4577	0.4447	0.4507	0.4220
2	0.4743	0.4280	0.3927	0.4247
3	0.3480	0.4073	0.4367	0.4333
Delta	0.1263	0.0373	0.0580	0.0113
Clasificar	1	3	2	4

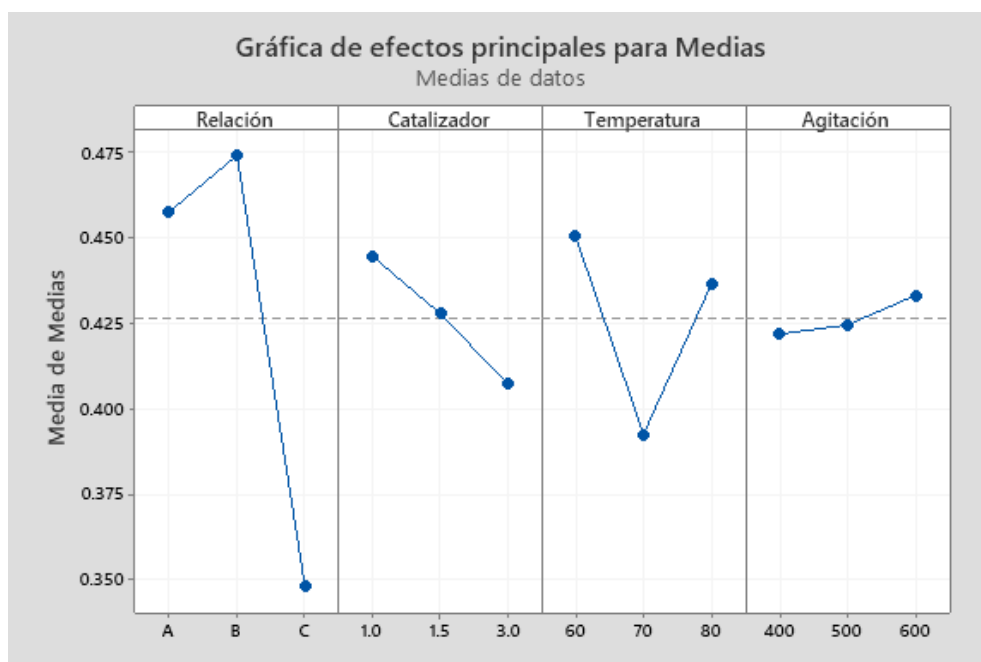
**Tabla 32**

*Análisis de varianza de medias*

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Catalizador	2	0.002790	0.001395	3.85	0.062
Temperatura	2	0.005912	0.002956	8.16	0.010
Agitación	2	0.000037	0.000019	0.05	0.950
Relación	2	0.070425	0.035212	97.24	0.000
Error	9	0.003259	0.000362		
Total	17	0.082423			

**Figura 36**

*Efectos principales del grado de conversión ( $X_A$ )*



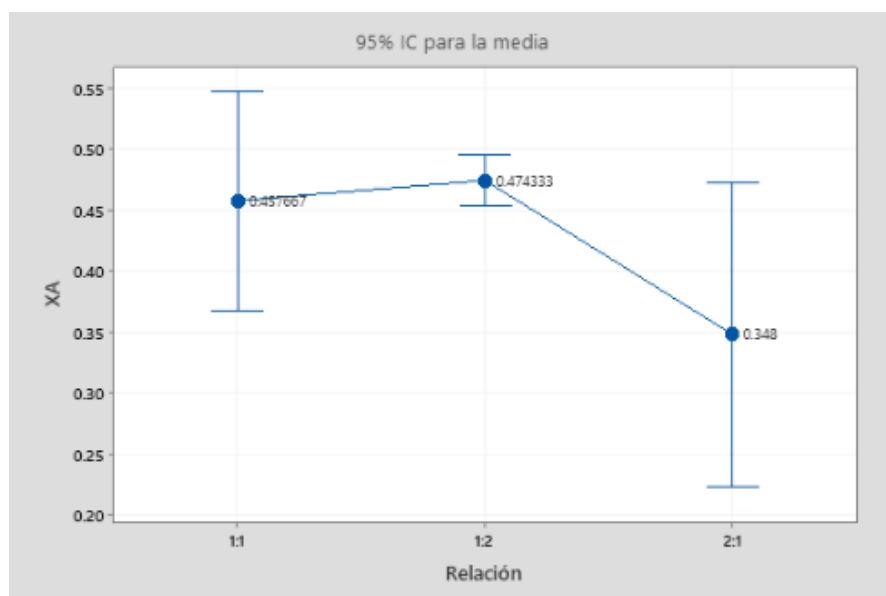
En la figura 36. Se observa el comportamiento de los factores de relación, % en peso de catalizador, temperatura y agitación de manera independiente, donde se obtiene un alto grado de conversión con una relación B= 2:1 [alcohol/ácido], un % de catalizador de 1%, una temperatura de 60°C y una velocidad de agitación de 600 RPM.

### **c) Variabilidad de medias de los factores**

En este segmento del estudio se observa el comportamiento de las medias de cada factor, esto nos permitió ver que tan dispersos se encuentran los datos recopilados en cada experimento y poder definir la condición óptima para encontrar el mejor grado de conversión.

### Figura 37

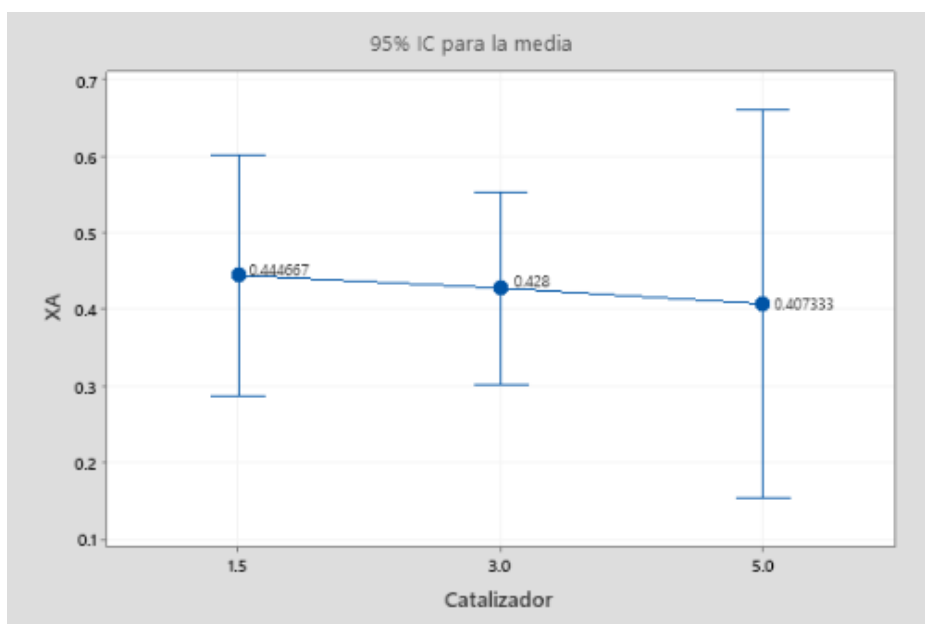
Efecto de las medias de la relación molar vs conversión



La figura 37, nos muestra la variabilidad de las medias por cada experiencia, en la cual se observa que la mayor dispersión de los datos se obtuvo en la relación 2:1 la cual presenta una media muy dispersa de las demás experiencias.

### Figura 38

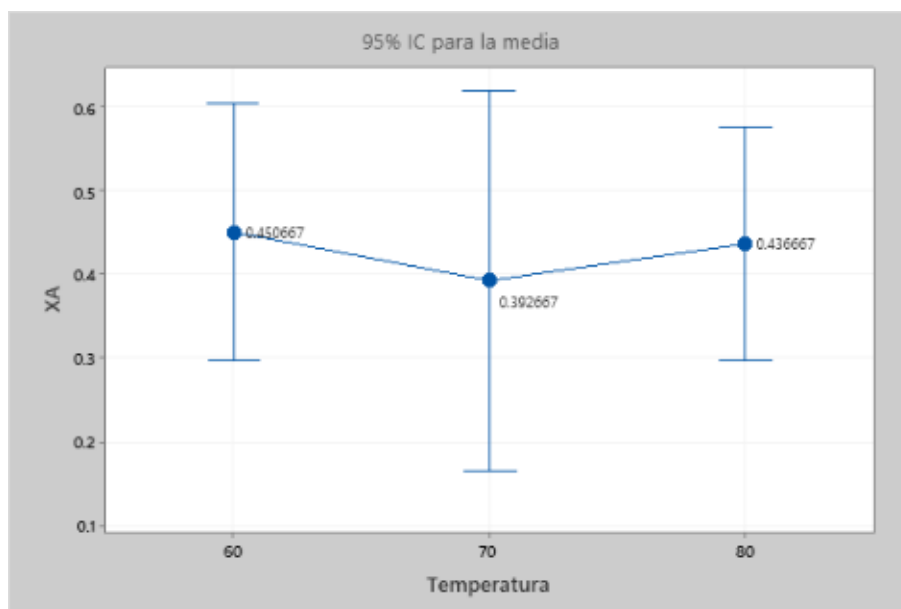
Efecto de las medias del % de Catalizador vs Conversión



En la figura 38, se observa que las medias para cada experiencia no poseen una variación considerable por lo que el porcentaje de conversión para cada experiencia no es muy diferente.

### Figura 39

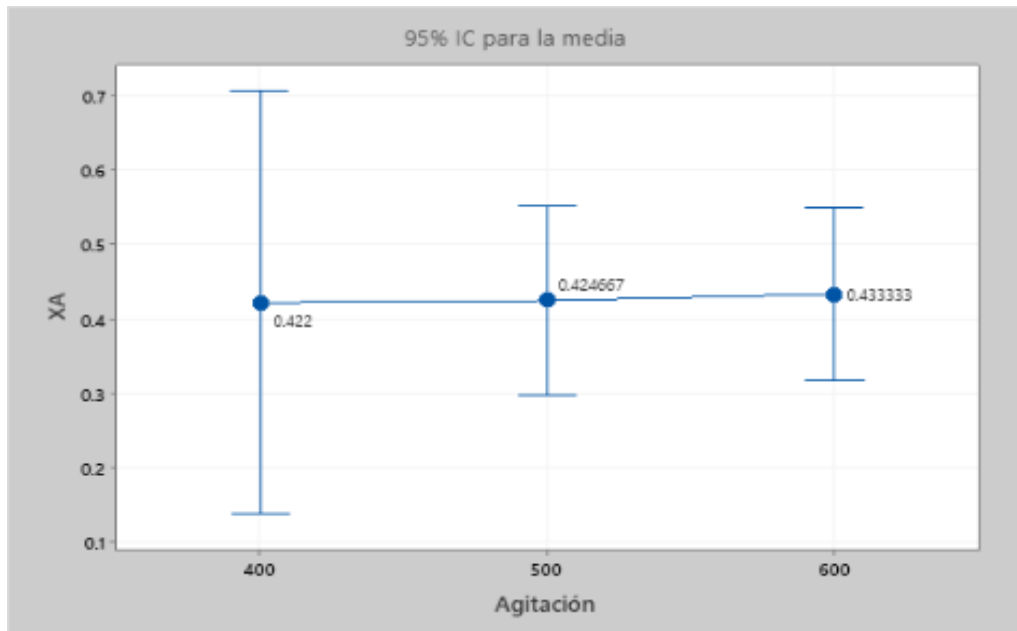
*Efecto de las principales medias de Temperatura vs Conversión*



La figura 39, podemos observar que los valores de las medias con respecto a la temperatura no están muy alejados y el grado de conversión obtenido en cada experiencia es similar.

### Figura 40

*Efecto de las principales medias de Velocidad de Agitación vs Conversión*



La figura 40, podemos observar que los valores de las medias con respecto a la agitación son similares y el grado de conversión posee una relación inversamente proporcional al incremento de los RPM.

## 6.2 Contrastación de los resultados con otros estudios similares.

Para la contrastación de los resultados del estudio se tomó tres puntos específicos, estos fueron los siguientes:

- ✓ El estudio del comportamiento de la constante de equilibrio con respecto a la temperatura de reacción.
- ✓ La conversión de la reacción con catalizador heterogéneo.
- ✓ La determinación de la energía de activación.

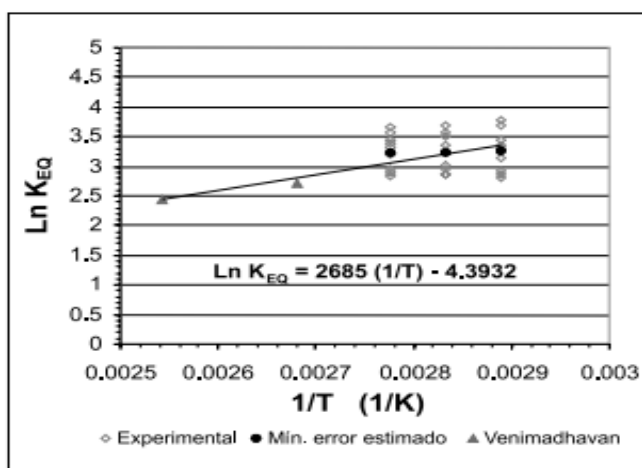
Estos nos permitieron comparar y analizar los resultados obtenidos, para ver la cercanía que se tiene con las referencias tomadas.

### a) Análisis comparativo del comportamiento de la constante de equilibrio vs la temperatura

Para poder realizar el estudio de comportamiento de la constante de equilibrio con respecto a la temperatura se tomó como referencia la linealización de la ecuación y la tendencia de esta, obteniendo un resultado y comportamiento similar como se muestra en la figura 41.

**Figura 41**

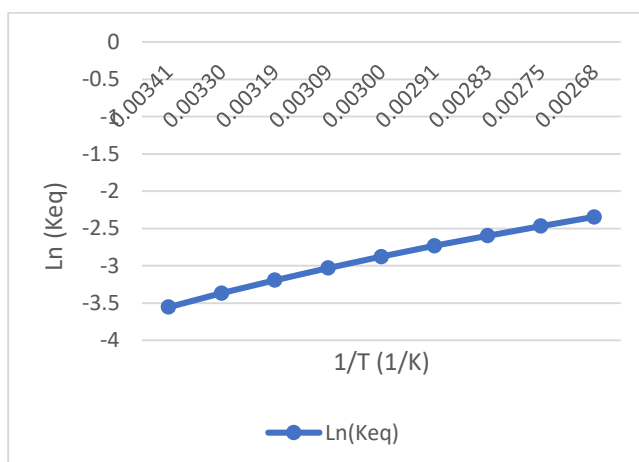
*Variación de la constante de equilibrio de reacción con el recíproco de la temperatura, sistema ácido acético - butanol*



**Fuente:** Orjuela y Leiva (2006)

**Figura 42**

*Variación del comportamiento de la constante de equilibrio respecto a la temperatura, sistema ácido acético - isopropanol*



Se determinó un modelo matemático similar al de Orjuela y Leiva, el cual fue originado de la relación de entalpías, energía de Gibbs y entropía (ver ecuación 41), contrastando que el comportamiento entre el sistema ácido acético butanol posee una misma tendencia creciente al del sistema ácido acético isopropanol utilizado en el estudio.

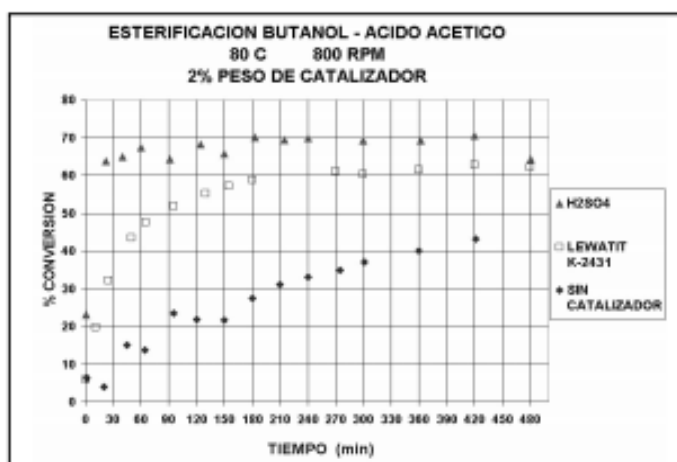
$$\ln(K_{eq}) = 2,08 - \frac{1651,43}{T} \quad (41)$$

### b) Estudio comparativo de la conversión de la reacción de esterificación utilizando Resinas de intercambio iónico

Para la obtención de un grado de conversión óptimo recurrimos a los estudios previamente realizados por Orjuela el cual obtuvo una conversión máxima del 60% utilizando como catalizador una resina Lewatit K-2431 a ciertas condiciones de operación (ver figura 43).

#### Figura 43

*Conversión en reacción para operación con y sin catalizador (relación molar 1:1, 80°C, 800 Rpm, 2% peso de catalizador)*

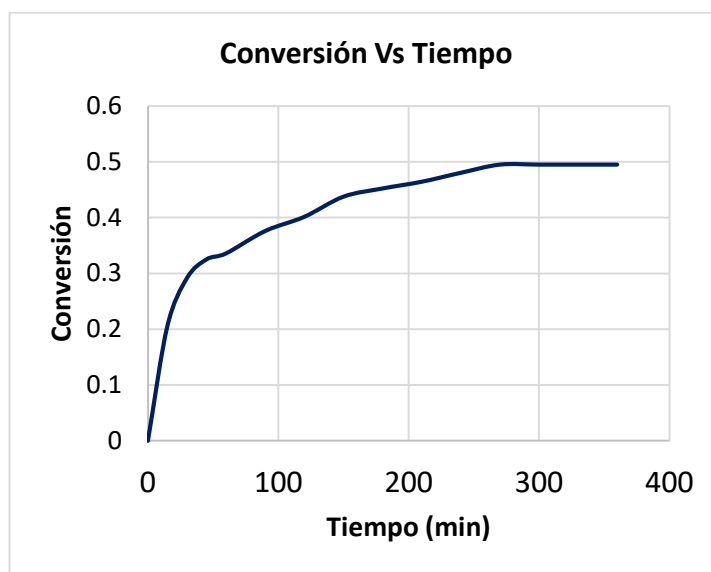


Fuente: Orjuela y Leiva (2006)

En la figura 43, se muestran el comportamiento del grado de conversión con respecto a un catalizador homogéneo ( $H_2SO_4$ ), un heterogéneo (Lewatit K-2431), y sin catalizador, concluyendo que el comportamiento del sistema heterogéneo fue muy similar al resultado obtenido.

#### Figura 44

*Conversión en reacción con catalizador Lewatit S-1567 (1:1, 60°C, 400 Rpm, 1.5% en peso de catalizador)*



Se determinó que al trabajar con una resina heterogénea (Lewatit S-1567) en un reactor por lotes a las condiciones mostradas en la figura 44, se logra predecir un comportamiento similar al del estudio de Orjuela ya mencionado, obteniéndose una conversión significativa de 50% la cual nos permite validar la efectividad del estudio realizado.



### c) Determinación de la energía de activación para la esterificación mediante la linealización de la ecuación de Arrhenius

**Ramirez** determina mediante datos experimentales una ecuación realizando la linealización de Arrhenius, esto con el único objetivo de encontrar el valor de la energía de activación para la reacción de esterificación (ver figura 45).

#### Ecuación de Arrhenius

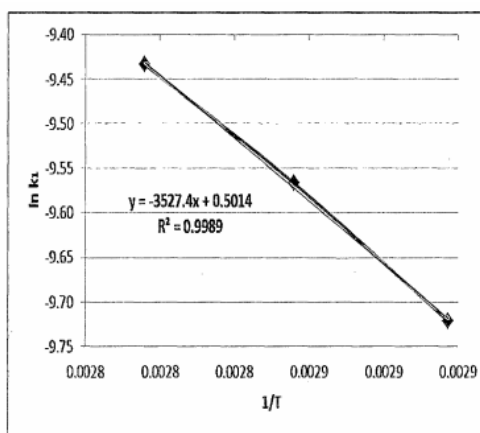
$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

#### Linealización de la ecuación de Arrhenius

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$

#### Figura 45

*Determinación de la energía de activación para la esterificación Etanol-Ácido Acético.*

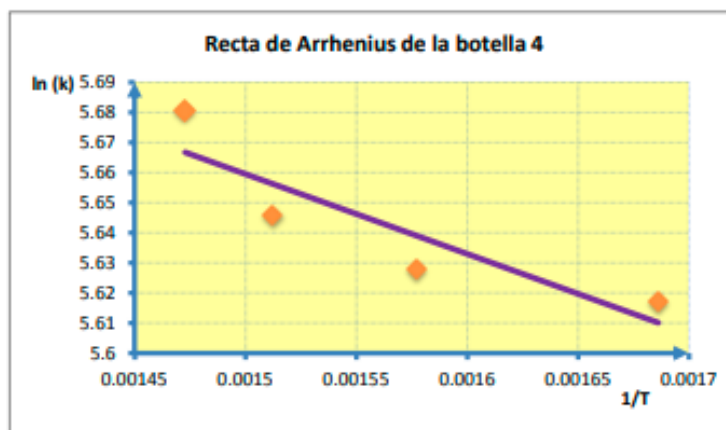


**Fuente:** Bernardino Ramirez (2015)

En la figura 45, se muestra como partiendo de la ecuación linealizada de Arrhenius y después de realizar una serie de regresión por mínimos cuadrados con los datos del estudio de Bernardino R. se logra obtener una relación entre la constante de equilibrio (Ln k) y la inversa de la temperatura (1/T), la cual nos otorga un modelo matemático logra explicar el comportamiento de estas dos variables.

**Figura 46**

*Determinación de la energía de activación para la esterificación del PET.*



**Fuente:** *Instituto de Materiales de la UNAM (Universidad Autónoma de México).*

Adicionalmente se realizó un estudio comparativo entre los resultados de energía de activación de un estudio del instituto de materiales de la **UNAM (Universidad Autónoma de México)** en el departamento de polímeros, así como los resultados del estudio del ingeniero Bernardino R. (**Ver tabla 33**). En el cual para realizar el análisis del Tereftalato de Polietileno (PET), determinó la mínima energía necesaria para llevar a cabo un efecto de cambio en la composición de cada una de las muestras colocadas en botellas.

**Tabla 33**

*Resumen de resultados de los estudios de energía de activación*

<b>Estudio</b>	<b>Sistema</b>	<b>Energía de activación (E<sub>a</sub>)</b>
Bernardino R.	Etanol – ácido Acético	29 328,3 J/ mol
UNAM	Tereftalato de polietileno	2 756,9961 J/ mol
Jair M. y Jordan E.	Isopropanol – ácido Acético	65 666,34 J/ mol

### **6.3 Responsabilidad ética de acuerdo con los reglamentos vigentes**

Los autores de la investigación se responsabilizan por la información emitida en el presente informe final de investigación, de acuerdo con el Reglamento del Código de Ética de a investigación de la UNAC, Resolución de Consejo Universitario N°260-2019-CU.

## VII. CONCLUSIONES

1. A la Temperatura de 60°C, Agitación de 400 RPM, una relación [Ácido]/[Base] de 1 a 1 y % de catalizador de 1.5% se obtuvo una conversión máxima de 50%, siendo esta la más representativa de las corridas realizadas.
2. A la temperatura de 60°C las constante cinética directa e inversa de la reacción de esterificación fueron de  $9.49 \times 10^{-04}$  y  $9.86 \times 10^{-04} \frac{L}{mol \times s}$  respectivamente, debido a que fue la más representativa de las corridas experimentales.
3. El porcentaje necesario de catalizador Lewatit S-1567 para obtener un grado de conversión del 50% fue de 1.5% en peso, cabe resaltar que el método de activación de la resina de intercambio iónico influye en su efectividad ante la reacción de esterificación.
4. Finalmente se concluye que se ha logrado determinar los parámetros adecuados para la síntesis del acetato de isopropilo utilizando una resina de intercambio iónico como catalizador y la ecuación cinética del proceso resultó.

$$\frac{d C_A}{dt} = (9.49 \times 10^{-04}) \cdot C_A \cdot C_B - (9.86 \times 10^{-04}) \cdot C_C \cdot C_D$$

## **VIII. RECOMENDACIONES**

1. Adaptar un sistema separador de componentes volátiles para mejorar el grado de conversión de la reacción.
2. Se sugiere investigar el método de activación de una resina de intercambio iónico para su implementación a nivel industrial.
3. Se sugiere realizar el estudio a temperaturas distintas a lo realizado.

## IX. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Arias M., Céspedes I., Fatjó D. (2006). La cinética de la esterificación de ácidos carboxílicos es de segundo orden con respecto al alcohol, Costa Rica. *Rev. Ciencia y Tecnología*, 24(2), 169 – 17.

Obtenido en: <http://revistas.ucr.ac.cr/index.php/cienciaytecnologia/article/view/2644>

Bamunusingha B., De Silva E. & Gunasekera M. (2015). Performance of ion exchange resin as solid catalyst for the esterification of acetic acid with ethanol. Katubedda, Moratuwa. *Rev. Journal of the National Science Foundation of Sri Lanka*, 44(1), 83 – 93.

Obtenido en: <http://doi.org/10.4038/jnsfsr.v44i1.7985>

Bhatia S., Mohamed A., Ahmad A. & Chin S. (2007). Production of isopropyl palmitate in a catalytic distillation column: comparison between experimental and simulation studies, *Seberang Perai Selatan, Penang, Malaysia*, *Rev* (3), 1187 – 1198.

Obtenido en: <https://ur.booksc.org/book/3523189/cff849>

Durst H. & Gokel G. (2006). Química orgánica experimental *San José, Costa Rica*, Editorial REVERTÉ, S.A.

Gehrke V., Marquardt W., Prozebtechnik L., et.al (1997). A singularity theory approach to the study of reactive distillation. *Aachen, Germany*. *Rev Computer's chem. Engng.*

Ibarra, G. (2010). Simulación del proceso de obtención de metanol de industrializar el gas natural en el Perú. *Tesis para optar el título profesional de ingeniero químico*. Universidad Nacional de Ingeniería, Lima.

Leves Piel. (2009) “INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS”, Barcelona, EDITORIAL REVERTÉ, S.A.

Londoño K. (2015). Estudio cinético de la esterificación del ácido acético con metanol sobre Amberlyst 15 en un micro reactor. *Tesis para optar el título profesional de Ingeniero Químico, Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia.*

Mazo P., Galeano L., Restrepo G. & Ríos L. (2007). *Esterificación de los ácidos grasos libres (ffa) del aceite crudo de palma. Calentamiento convencional vs microondas.* Antioquia Colombia. *Rev. Scientia et Technica* Año XIII, 51, 81 – 86.

Obtenido en: <https://revistas.utp.edu.co/index.php/revistaciencia/article/view/5481>

Medina Collana, J. (2017). Esterificación de ácido acético y etanol en un reactor batch con presencia de ácido sulfúrico como catalizador. *Trabajo de investigación, Universidad Nacional del Callao, Callao, Perú.*

Orjuela A. & Leiva F. (2006). Estudio de la síntesis de acetato de butilo-4 análisis de las condiciones de equilibrio químico, *Medellín Colombia. Rev. Ingeniería e Investigación, 25, 13 - 21.*

Obtenido en: <https://www.redalyc.org/pdf/643/64325302.pdf>

Orjuela A., Leiva F. & Boyacá L. (2006). Estudio de la síntesis de acetato de butilo-4 cinética de reacción, *Medellín Colombia. Rev. Ingeniería e Investigación. 26, 28 -36.*

Obtenido en: <https://www.redalyc.org/pdf/643/64326205.pdf>

Ramirez B. (2013), esterificación –destilación de ácido acético y metanol catalizado con resina de intercambio catiónico: Amberlyst 15. *Trabajo de investigación. Universidad Nacional del Callao, Lima.*

Ramirez, B. (2015). Obtención de acetato de etilo por destilación reactiva con resina ácida como catalizador. *Trabajo de investigación. Universidad Nacional del Callao, Lima.*

Rosalyn Velasque A. (2018), influencia del efecto cinético de reacción y características de operación de los platos con caída de presión en columna de destilación reactiva, para la obtención de acetato de etilo de alta pureza, *tesis para optar el título de Ingeniero Químico, Universidad Nacional de Trujillo, Trujillo.*

Schwarzer R. (2006), *esterificación del ácido acético con metanol: estudio de la cinética con Amberlyst 15. Universidad de Pretoria, Pretoria.*

Tischmeyer M., W. Arlt (2004). Determination of binary vapor –liquid equilibria (vle) of three fast reacting esterification systems. *Berlin, Germany.*

Wei Qi & Malone M. (2011). Semi batch reactive distillation for isopropyl acetate synthesis. *Department of Chemical Engineering, University of Massachusetts, Amherst, Massachusetts.*



## ANEXOS

### ANEXO 1: Matriz de Consistencia

#### “EVALUACIÓN DE LAS VARIABLES DE OPERACIÓN DE UN REACTOR BATCH, EN LA SINTESIS DE ACETATO DE ISOPROPILO USANDO RESINA DE INTERCAMBIO IONICO COMO CATALIZADOR

Formulación del problema	Objetivos	Hipótesis	Variables	Dimensiones	Indicadores	Método
<b>Problema General</b>	<b>Objetivo General</b>	<b>Hipótesis General</b>	<b>V. Dependientes</b>			
¿Cómo se evaluarán las variables de operación mediante un reactor batch en la síntesis del acetato de isopropilo, usando la resina de intercambio iónico como catalizador?	Evaluar las variables de operación mediante un reactor batch en la síntesis del acetato de isopropilo, usando la resina de intercambio iónico.	Para evaluar las variables de operación mediante un reactor batch en la síntesis del acetato de isopropilo, usando la resina de intercambio iónico dependerá del desempeño cada uno de los parámetros para obtener una conversión de $X_A=0.55$ .	$Y_1 = \%$ de conversión óptima del producto.	$Y_1 = \%$ Porcentaje de conversión	$Y_1 = \%$ $X_A$	Experimental Estadístico (DOE)
<b>Problemas Específicos</b>	<b>Objetivos Específicos</b>	<b>Hipótesis Específicos</b>	<b>V. Independientes</b>			
<p>✓ ¿Cuál será la expresión cinética de síntesis de acetato de isopropilo?</p> <p>✓ ¿Cómo será el desempeño del catalizador en la reacción de esterificación?</p> <p>✓ ¿Cuál será la temperatura y la velocidad de agitación más adecuada para alcanzar la mayor conversión?</p>	<p>✓ Determinar la expresión cinética de síntesis de acetato de isopropilo.</p> <p>✓ Determinar el desempeño del catalizador en la reacción de esterificación con cada ensayo.</p> <p>✓ Determinar la temperatura y la velocidad de agitación más adecuada para alcanzar la mayor conversión.</p>	<p>✓ La expresión cinética será determinada con las constantes de equilibrio <math>k_1</math> y <math>k_2</math> mediante la correlación de la temperatura de la reacción de síntesis del acetato.</p> <p>✓ El desempeño del catalizador se verá reflejado conforme se obtenga un óptimo grado de conversión en la síntesis del éster.</p> <p>✓ La temperatura de operación y la velocidad de agitación se determinarán durante las corridas experimentales y dependiendo de los resultados obtenidos.</p>	<p>✓ <math>X_1 =</math> Relación de concentraciones.</p> <p>✓ <math>X_2 =</math> Concentración de catalizador.</p> <p>✓ <math>X_3 =</math> Temperatura y velocidad de agitación.</p>	<p><math>X_1 =</math> Relación molar</p> <p><math>X_2 =</math> Porcentaje en peso</p> <p><math>X_3 =</math> Temperatura</p> <p><math>X_4 =</math> Agitación</p>	<p><math>X_1 =</math> Molar, mg/L</p> <p><math>X_2 = \%</math> w/w</p> <p><math>X_3 =</math> Celsius (<math>^{\circ}</math>C)</p> <p><math>X_4 =</math> Rpm</p>	<p>Experimental</p> <p>Experimental</p> <p>Instrumental Medición</p> <p>Experimental Estadístico</p>

Fuente: Elaboración propia

## ANEXO 2: Fotografías del desarrollo del experimento

### a) Equipo de esterificación



**Fuente:** Elaboración propia. *Instalaciones del Laboratorio de Procesos Unitarios (LOPU) - UNAC*

### b) Reactor en operación



**Fuente:** Elaboración propia. *Instalaciones del Laboratorio de Procesos Unitarios (LOPU) - UNAC*

## ANEXO 3: Tablas de entalpías de formación de energía de Gibbs y Entropía

### a) Acetato de Isopropilo

NO	FORMULA	NAME	Mol Wt g/mol	state	$\Delta H_f$	$\Delta G_f$	$\Delta S_f$	$\Delta A_f$
					@298 kJ/mol	@298 kJ/mol	@298 kJ/mol	@298 kJ/mol
394	C5H8O2	VINYL PROPIONATE	100.117	gas	-347.36	-236.76	-337.44	-226.84
395	C5H8O3	2-HYDROXYETHYL ACRYLATE	116.117	gas	-493.00	-371.00	-481.85	-359.85
396	C5H8O3	LEVULINIC ACID	116.117	gas	-607.00	-478.00	-595.85	-466.85
397	C5H8O3	METHYL ACETOACETATE	116.117	gas	-589.00	-465.00	-577.85	-453.85
398	C5H8O4	GLUTARIC ACID	132.116	gas	-844.00	-690.00	-831.61	-677.61
399	C5H9N	VALERONITRILE	83.133	gas	11.46	114.74	21.38	124.66
400	C5H9NO	n-BUTYL ISOCYANATE	99.133	gas	-127.00	1.96	-115.85	13.11
401	C5H9NO	N-METHYL-2-PYRROLIDONE	99.133	gas	-195.39	-53.42	-184.24	-42.27
402	C5H9NO4	L-GLUTAMIC ACID	147.131	gas	-824.00	-636.00	-809.13	-621.13
403	C5H10	CYCLOPENTANE	70.134	gas	-77.24	38.62	-67.32	48.53
404	C5H10	2-METHYL-1-BUTENE	70.134	gas	-36.32	65.61	-26.40	75.52
405	C5H10	2-METHYL-2-BUTENE	70.134	gas	-42.55	59.66	-32.64	69.58
406	C5H10	3-METHYL-1-BUTENE	70.134	gas	-28.95	74.77	-19.04	84.68
407	C5H10	1-PENTENE	70.134	gas	-20.92	79.12	-11.00	89.03
408	C5H10	cis-2-PENTENE	70.134	gas	-28.07	71.84	-18.16	81.75
409	C5H10	trans-2-PENTENE	70.134	gas	-31.76	69.91	-21.84	79.83
410	C5H10Br2	2,3-DIBROMO-2-METHYLBUTANE	229.942	gas	-138.91	-13.35	-128.99	-3.43
411	C5H10Cl2	1,5-DICHLOROPENTANE	141.040	gas	-200.00	-58.20	-187.61	-45.81
412	C5H10O	METHYL ISOPROPYL KETONE	86.134	gas	-262.40	-139.00	-251.25	-127.85
413	C5H10O	2-PENTANONE	86.134	gas	-258.65	-137.07	-247.50	-125.91
414	C5H10O	DIETHYL KETONE	86.134	gas	-259.20	-135.06	-248.05	-123.91
415	C5H10O	VALERALDEHYDE	86.134	gas	-227.82	-108.28	-216.66	-97.13
416	C5H10O2	n-BUTYL FORMATE	102.133	gas	-425.09	-283.67	-412.70	-271.28
417	C5H10O2	ETHYL PROPIONATE	102.133	gas	-463.60	-319.30	-451.21	-306.91
418	C5H10O2	ISOBUTYL FORMATE	102.133	gas	-436.30	-293.20	-423.91	-280.81
419	C5H10O2	ISOPROPYL ACETATE	102.133	gas	-481.70	-333.70	-469.31	-321.31
420	C5H10O2	n-PROPYL ACETATE	102.133	gas	-464.80	-320.40	-452.41	-308.01
421	C5H10O2	METHYL n-BUTYRATE	102.133	gas	-450.70	-305.30	-438.31	-292.91
422	C5H10O2	2-METHYLBUTYRIC ACID	102.133	gas	-498.00	-352.00	-485.61	-339.61
423	C5H10O2	ISOVALERIC ACID	102.133	gas	-514.70	-367.00	-502.31	-354.61
424	C5H10O2	VALERIC ACID	102.133	gas	-490.36	-346.00	-477.97	-333.61
425	C5H10O2	TETRAHYDROFURFURYL ALCOHOL	102.133	gas	-369.20	-216.00	-356.81	-203.61
426	C5H10O2S	3-METHYL SULFOLANE	134.199	gas	-420.00	-257.02	-407.61	-244.63
427	C5H10O3	DIETHYL CARBONATE	118.133	gas	-639.10	-464.65	-625.47	-451.02
428	C5H10O3	ETHYL LACTATE	118.133	gas	-635.00	-476.00	-621.37	-462.37
429	C5H10S	THIACYCLOHEXANE	102.194	gas	-63.26	53.05	-53.35	62.97
430	C5H10S	CYCLOPENTANETHIOL	102.194	gas	-47.91	57.03	-37.99	66.94
431	C5H11Br	1-BROMOPENTANE	151.046	gas	-129.16	-5.73	-118.01	5.42
432	C5H11Cl	1-CHLOROPENTANE	106.595	gas	-174.89	-37.40	-162.50	-25.01
433	C5H11Cl	1-CHLORO-3-METHYLBUTANE	106.595	gas	-180.33	-43.68	-167.94	-31.29
434	C5H11Cl	2-CHLORO-2-METHYLBUTANE	106.595	gas	-202.51	-56.48	-190.11	-44.09
435	C5H11N	N-METHYLPYRROLIDINE	85.149	gas	-8.12	145.00	4.27	157.39
436	C5H11N	PIPERIDINE	85.149	gas	-48.90	102.00	-36.51	114.39
437	C5H11NO	tert-BUTYLFORMAMIDE	101.148	gas	-284.00	-114.00	-270.37	-100.37
438	C5H12	ISOPENTANE	72.150	gas	-154.47	-14.81	-142.08	-2.42
439	C5H12	NEOPENTANE	72.150	gas	-165.98	-15.23	-153.59	-2.84
440	C5H12	n-PENTANE	72.150	gas	-146.44	-8.37	-134.05	4.03
441	C5H12O	2,2-DIMETHYL-1-PROPANOL	88.150	gas	-319.07	-155.38	-305.44	-141.75
442	C5H12O	tert-PENTYL-ALCOHOL	88.149	gas	-329.07	-165.77	-315.44	-152.14
443	C5H12O	2-METHYL-1-BUTANOL	88.150	gas	-302.09	-146.71	-288.46	-133.08
444	C5H12O	2-METHYL-2-BUTANOL	88.150	gas	-329.70	-165.27	-316.07	-151.64
445	C5H12O	3-METHYL-1-BUTANOL	88.150	gas	-302.09	-145.00	-288.46	-131.37
446	C5H12O	3-METHYL-2-BUTANOL	88.150	gas	-314.22	-156.36	-300.59	-142.73
447	C5H12O	1-PENTANOL	88.150	gas	-302.38	-149.75	-288.74	-136.11
448	C5H12O	2-PENTANOL	88.150	gas	-313.80	-159.29	-300.17	-145.66
449	C5H12O	3-PENTANOL	88.150	gas	-316.73	-158.16	-303.10	-144.53
450	C5H12O	METHYL sec-BUTYL ETHER	88.150	gas	-275.00	-116.80	-261.37	-103.17
451	C5H12O	METHYL tert-BUTYL ETHER	88.150	gas	-292.88	-125.44	-279.25	-111.80
452	C5H12O	METHYL ISOBUTYL ETHER	88.150	gas	-266.00	-107.00	-253.61	-94.61
453	C5H12O	ETHYL PROPYL ETHER	88.150	gas	-272.20	-115.20	-258.57	-101.57
454	C5H12O2	ETHYLENE GLYCOL MONOPROPYL ETHER	104.149	gas	-421.00	-248.00	-406.13	-233.13
455	C5H12O2	NEOPENTYL GLYCOL	104.149	gas	-447.00	-264.00	-432.13	-249.13
456	C5H12O2	1,3-PENTANEDIOL	104.149	gas	-449.00	-275.00	-434.13	-260.13
457	C5H12O3	2-(2-METHOXYETHOXY)ETHANOL	120.148	gas	-530.00	-367.00	-513.89	-350.89
458	C5H12O4	PENTAERYTHRITOL	136.148	gas	-776.70	-542.65	-759.35	-525.30
459	C5H12S	n-PENTYL MERCAPTAN	104.216	gas	-108.41	19.37	-96.01	31.77

b) n-propanol

NO	FORMULA	NAME	Mol. Wt. g/mol	state	$\Delta H_f$			
					298	298	298	298
					kJ/mol	kJ/mol	kJ/mol	kJ/mol
196	C3H7Br	2-BROMOPROPANE	122.993	gas	-97.07	-27.24	-90.87	-21.04
197	C3H7Cl	ISOPROPYL CHLORIDE	78.541	gas	-148.44	-62.51	-139.00	-59.07
198	C3H7Cl	n-PROPYL CHLORIDE	78.541	gas	-130.12	-59.67	-122.69	-43.23
199	C3H7F	1-FLUOROPROPANE	62.087	gas	-281.16	-209.29	-273.73	-192.85
200	C3H7F	2-FLUOROPROPANE	62.087	gas	-288.70	-204.22	-281.26	-198.78
201	C3H7I	ISOPROPYL IODIDE	169.993	gas	-41.84	20.08	-35.64	26.28
202	C3H7I	n-PROPYL IODIDE	169.993	gas	-30.54	27.95	-24.35	34.15
203	C3H7N	ALLYLAMINE	57.095	gas	58.20	135.00	65.64	142.44
204	C3H7N	PROPYLENEIMINE	57.095	gas	88.80	173.00	96.24	180.44
205	C3H7NO	N,N-DIMETHYLFORMAMIDE	73.095	gas	-191.79	-88.41	-183.02	-79.73
206	C3H7NO	N-NITRYLACETAMIDE	73.095	gas	-240.80	-135.09	-231.32	-126.32
207	C3H7NO2	1-NITROPROPANE	89.094	gas	-124.68	0.33	-114.77	-18.25
208	C3H7NO2	2-NITROPROPANE	89.094	gas	-140.16	-12.80	-130.25	-2.89
209	C3H7NO3	PROPYL-NITRATE	105.093	gas	-174.66	-27.32	-162.90	-16.17
210	C3H7NO3	ISOPROPYL-NITRATE	105.093	gas	-191.60	-40.67	-179.84	-29.51
211	C3H8	PROPANE	44.096	gas	-103.85	-23.47	-96.41	-16.04
212	C3H8	ISOPROPANE	60.096	gas	-272.59	-175.59	-263.91	-164.92
213	C3H8O	METHYL ETHYL ETHER	60.096	gas	-216.44	-117.65	-207.76	-108.98
214	C3H8O	n-PROPANOL	60.096	gas	-257.53	-162.67	-248.85	-154.29
215	C3H8O2	2-METHOXYETHANOL	76.095	gas	-434.00	-319.00	-424.00	-309.00
216	C3H8O2	METHYLAL	76.095	gas	-348.20	-226.31	-338.28	-216.39
217	C3H8O2	1,2-PROPYLENE GLYCOL	76.095	gas	-421.50	-304.68	-411.58	-294.56
218	C3H8O2	1,3-PROPYLENE GLYCOL	76.095	gas	-392.10	-277.18	-382.18	-267.26
219	C3H8O3	GLYCEROL	92.095	gas	-582.00	-448.49	-571.65	-437.34
220	C3H8S	n-PROPYLMERCAPTAN	76.163	gas	-67.86	2.18	-60.43	9.41
221	C3H8S	ISOPROPYL MERCAPTAN	76.163	gas	-76.23	-2.55	-68.80	4.88
222	C3H8S	ETHYL-METHYL-SULFIDE	76.156	gas	-59.62	11.42	-52.19	18.86
223	C3H9N	n-PROPYLAMINE	59.111	gas	-72.38	39.79	-62.47	49.71
224	C3H9N	ISOPROPYLAMINE	59.111	gas	-83.89	31.93	-73.88	41.85
225	C3H9N	TRIMETHYLAMINE	59.111	gas	-23.85	98.91	-13.93	108.83
226	C3H9NO	1-AMINO-2-PROPANOL	75.111	gas	-239.80	-108.00	-227.85	-96.85
227	C3H9NO	3-AMINO-1-PROPANOL	75.111	gas	-221.00	-91.00	-209.85	-79.85
228	C3H9NO	METHYLETHANOLAMINE	75.111	gas	-198.00	-61.10	-186.85	-49.95
229	C3H9O4P	TRIMETHYL PHOSPHATE	140.076	gas	-1080.00	-----	-1066.57	-----
230	C3H10N2	1,2-PROPANEDIAMINE	74.126	gas	-53.68	95.83	-41.29	108.22
231	C3H10Si	TRIMETHYL SILANE	74.198	gas	-156.61	-69.91	-146.69	-39.99
232	C4Cl4	TETRACHLOROETHYLENE	221.921	gas	-----	-----	-----	-----
233	C4Cl6	HEXACHLORO-1,3-BUTADIENE	260.760	gas	-44.76	22.75	-41.78	27.70
234	C4F8	OCTAFLURO-2-BUTENE	200.031	gas	-1659.00	-1520.00	-1642.56	-1522.56
235	C4F8	OCTAFLUROCYCLOBUTANE	200.031	gas	-1528.00	-1398.84	-1520.56	-1391.60
236	C4F10	DECAFLUROBUTANE	238.028	gas	-2140.00	-1970.00	-2130.00	-1960.00
237	C4H2	BUTADIENE (DIACETYLENE)	50.068	gas	472.79	443.98	472.79	443.98
238	C4H2O3	MALEIC ANHYDRIDE	98.058	gas	-398.30	-305.00	-394.36	-351.28
239	C4H4	VINYLAETYLENE	52.076	gas	304.60	305.98	307.07	308.43
240	C4H6N2	SUCCINONITRILE	80.087	gas	209.70	254.01	214.66	258.97
241	C4H4O	FURAN	68.075	gas	-34.69	0.88	-30.97	4.68
242	C4H6O2	DIBUTENE	84.075	gas	-160.20	-103.24	-103.24	-131.04
243	C4H6O3	SUCCINIC ANHYDRIDE	100.076	gas	-524.10	-448.00	-517.90	-441.80
244	C4H6O4	FUMARIC ACID	116.073	gas	-671.95	-582.16	-664.51	-574.72
245	C4H6O4	MALEIC ACID	116.073	gas	-675.80	-588.09	-668.36	-578.65
246	C4H6S	THIOPHENE	84.142	gas	115.73	126.78	118.21	129.25
247	C4H5Cl	CHLOROPRENE	88.536	gas	73.01	114.84	77.97	119.80
248	C4H5N	trans-CROTONEITRILE	67.090	gas	140.79	184.46	145.66	189.42
249	C4H5N	cis-CROTONEITRILE	67.090	gas	143.40	185.50	148.36	190.66
250	C4H5N	METHACRYLONITRILE	67.090	gas	98.03	164.00	102.99	168.96
251	C4H5N	PIRROLE	67.090	gas	108.28	160.29	113.24	165.25
252	C4H5N	VINYLAETONITRILE	67.090	gas	157.80	200.00	162.76	204.96
253	C4H5NO2	METHYL CYANACETATE	99.089	gas	-257.00	-157.00	-229.56	-149.56
254	C4H6	CYCLOBUTENE	54.091	gas	129.70	174.72	134.66	179.68
255	C4H6	1,2-BUTADIENE	54.092	gas	162.21	198.45	167.17	203.40
256	C4H6	1,3-BUTADIENE	54.092	gas	199.16	190.67	195.12	155.62
257	C4H6	DIMETHYLACETYLENE	54.092	gas	146.31	185.43	151.27	190.39
258	C4H6	ETHYLACETYLENE	54.092	gas	165.18	202.09	170.14	207.04
259	C4H6Cl2	1,3-DICHLORO-trans-2-BUTENE	124.997	gas	-79.00	5.86	-71.56	13.30
260	C4H6Cl2	1,4-DICHLORO-cis-2-BUTENE	124.997	gas	78.20	108.50	85.64	115.94
261	C4H6Cl2	1,4-DICHLORO-trans-2-BUTENE	124.997	gas	-66.20	9.72	-58.76	17.16

Fuente: Datos obtenidos de YAWS, L. CARL, 1999 [30]

c) ácido acético

NO	FORMULA	NAME	Mol Wt g/mol	state	$\Delta_f H_1$	$\Delta_f H_2$	$\Delta_f H_3$	$\Delta_f H_4$
					kJ/mol	kJ/mol	kJ/mol	kJ/mol
64	C2HClF2	2-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHYLENE	98.479	gas	-329.60	-303.00	-326.52	-300.52
65	C2HCl3	TRICHLOROETHYLENE	131.388	gas	-9.62	16.07	-7.14	18.55
66	C2HCl3O	DICHLOROACETYL CHLORIDE	147.387	gas	-280.83	-232.15	-277.11	-228.43
67	C2HCl3O	TRICHLOROACETALDEHYDE	147.387	gas	-197.60	-148.00	-193.28	-144.28
68	C2HCl5	PENTACHLOROETHANE	202.293	gas	-142.26	-66.65	-137.30	-61.69
69	C2HF3	TRIFLUOROETHENE	82.025	gas	-490.76	-464.47	-488.30	-461.99
70	C2HF3O2	TRIFLUOROACETIC ACID	114.024	gas	-1021.70	-946.00	-1016.74	-941.04
71	C2HF5	PENTAFLUOROETHANE	120.022	gas	-1104.60	-1030.10	-1089.64	-1025.14
72	C2H2	ACETYLENE	26.038	gas	226.73	209.20	226.73	209.20
73	C2H2Br4	1,1,2,2-TETRABROMOETHANE	343.654	gas	10.88	24.70	10.88	24.70
74	C2H2Cl2	1,1-DICHLOROETHYLENE	96.943	gas	3.38	25.40	4.86	27.00
75	C2H2Cl2	cis-1,2-DICHLOROETHYLENE	96.943	gas	-2.80	19.66	-0.32	22.14
76	C2H2Cl2	trans-1,2-DICHLOROETHYLENE	96.943	gas	-0.42	22.01	2.06	25.49
77	C2H2Cl2O	CHLOROACETYL CHLORIDE	112.943	gas	-245.60	-203.37	-241.88	-199.65
78	C2H2Cl2O	DICHLOROACETALDEHYDE	112.943	gas	-201.00	-160.00	-197.28	-156.28
79	C2H2Cl2O2	DICHLOROACETIC ACID	128.942	gas	-436.00	-368.00	-431.04	-363.04
80	C2H2Cl3F	1,1,1-TRICHLOROFLUOROETHANE	151.394	gas	-302.00	-234.00	-297.04	-229.04
81	C2H2Cl4	1,1,1,2-TETRACHLOROETHANE	167.849	gas	-149.40	-80.30	-144.44	-75.34
82	C2H2Cl4	1,1,2,2-TETRACHLOROETHANE	167.849	gas	-152.72	-85.36	-147.76	-80.61
83	C2H2F2	1,1-DIFLUOROETHYLENE	64.035	gas	-336.81	-313.89	-334.33	-310.61
84	C2H2F2	cis-1,2-DIFLUOROETHENE	64.035	gas	-322.17	-299.49	-319.69	-297.01
85	C2H2F2	trans-1,2-DIFLUOROETHENE	64.035	gas	-322.17	-299.32	-319.69	-296.84
86	C2H2F4	1,1,1,2-TETRAFLUROETHANE	102.031	gas	-893.79	-826.90	-890.83	-821.94
87	C2H2O	KETENE	42.037	gas	-61.09	-60.29	-59.85	-59.05
88	C2H2O4	OXALIC ACID	90.036	gas	-723.70	-661.00	-718.74	-656.04
89	C2H3Br	VINYL BROMIDE	106.950	gas	78.37	80.79	79.61	81.99
90	C2H3Cl	VINYL CHLORIDE	62.499	gas	28.45	42.93	30.93	45.41
91	C2H3ClF2	1-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHANE	100.495	gas	-487.00	-423.00	-482.04	-418.04
92	C2H3ClO	ACETYL CHLORIDE	78.498	gas	-243.93	-206.23	-240.21	-202.51
93	C2H3ClO	CHLOROACETALDEHYDE	78.498	gas	-191.00	-156.00	-187.28	-152.28
94	C2H3ClO2	CHLOROACETIC ACID	94.497	gas	-436.20	-373.50	-431.24	-368.54
95	C2H3ClO3	METHYL CHLOROFORMATE	94.497	gas	-424.00	-361.00	-419.04	-356.04
96	C2H3Cl3	1,1,1-TRICHLOROETHANE	133.404	gas	-142.30	-76.19	-137.34	-71.23
97	C2H3Cl3	1,1,2-TRICHLOROETHANE	133.404	gas	-138.49	-77.49	-133.53	-72.53
98	C2H3F	VINYL FLUORIDE	46.044	gas	-158.01	-125.06	-156.43	-122.58
99	C2H3F3	1,1,1-TRIFLUOROETHANE	84.041	gas	-745.50	-678.77	-740.63	-673.81
100	C2H3N	ACETONITRILE	41.053	gas	87.86	105.40	90.34	108.00
101	C2H3NO	METHYL ISOCYANATE	57.052	gas	-57.78	-17.70	-54.06	-13.98
102	C2H4	ETHYLENE	28.054	gas	52.30	68.12	54.78	70.59
103	C2H4Br2	1,1-DIBROMOETHANE	187.842	gas	-60.80	-19.81	-58.32	-9.33
104	C2H4Br2	1,2-DIBROMOETHANE	187.842	gas	-58.91	-10.59	-56.43	-8.11
105	C2H4Cl2	1,1-DICHLOROETHANE	98.959	gas	-129.91	-73.09	-124.96	-68.14
106	C2H4Cl2	1,2-DICHLOROETHANE	98.959	gas	-129.70	-73.85	-124.75	-68.89
107	C2H4Cl2O	BIS(CHLOROMETHYL) ETHER	114.959	gas	-241.00	-170.00	-236.00	-165.00
108	C2H4F2	1,1-DIFLUOROETHANE	66.051	gas	-493.71	-436.32	-488.75	-431.27
109	C2H4F2	1,2-DIFLUOROETHANE	66.051	gas	-431.00	-375.00	-426.04	-370.04
110	C2H4I2	1,2-DIIODOETHANE	281.863	gas	66.53	78.49	69.00	80.97
111	C2H4O	ACETALDEHYDE	44.053	gas	-166.36	-133.30	-162.64	-129.58
112	C2H4O	ETHYLENE OXIDE	44.053	gas	-52.65	-15.10	-48.92	-9.30
113	C2H4O3	THIOACETIC ACID	76.113	gas	-181.96	-154.01	-178.24	-150.29
114	C2H4O2	ACETIC ACID	60.053	gas	-434.64	-376.68	-429.89	-371.73
115	C2H4O2	METHYL FORMATE	60.053	gas	-349.78	-297.19	-344.82	-292.23
116	C2H4S	THIACYCLOPROPANE	60.114	gas	82.22	96.90	84.69	99.38
117	C2H5Br	BROMOETHANE	108.964	gas	-64.02	-26.32	-60.30	-22.60
118	C2H5Cl	ETHYL CHLORIDE	64.514	gas	-111.71	-60.00	-106.76	-55.04
119	C2H5ClO	2-CHLOROETHANOL	80.514	gas	-262.00	-193.00	-255.80	-186.80
120	C2H5F	ETHYL FLUORIDE	48.060	gas	-261.50	-209.53	-256.54	-204.50
121	C2H5I	ETHYL IODIDE	155.966	gas	-8.37	21.34	-4.65	25.06
122	C2H5N	ETHYLENE DRIAMINE	43.068	gas	123.45	177.99	128.39	182.95
123	C2H5NO	ACETANIDE	59.068	gas	-238.30	-199.60	-232.10	-193.40
124	C2H5NO	N-METHYLFORMAMIDE	59.068	gas	-184.43	-108.23	-178.23	-102.03
125	C2H5NO2	NITROETHANE	75.067	gas	-101.25	-4.90	-93.82	2.54
126	C2H5NO3	ETHYL NITRATE	91.066	gas	-153.97	-36.86	-145.30	-28.19
127	C2H6	ETHANE	30.070	gas	-84.68	-52.93	-79.73	-27.97
128	C2H6AlCl	DIMETHYLALUMINUM CHLORIDE	92.054	gas	.....	.....	.....	.....
129	C2H6O	DIMETHYL ETHER	46.069	gas	-184.05	-112.93	-177.86	-106.73

Fuente: Datos obtenidos de YAWS, L. CARL, 1999 [30]

#### **ANEXO 4: Preparación de la resina Lewatit S-1567 en forma ácida**

La resina Lewatit S-1567 fue adquirida en su forma de Na<sup>+</sup>, fue necesario convertir la resina a su forma ácida, para lograr esto se instaló un sistema para el lavado de la resina y el intercambio iónico de esta.

##### **a) Columna de lavado para intercambio de iones de la resina Lewatit S-1567**



**Fuente:** Elaboración propia. *Instalaciones del Laboratorio de Procesos Unitarios (LOPU) – UNAC*

El sistema consta de una bureta de un diámetro de 5 cm, una pera de decantación donde se colocará la resina, estas sostenidas mediante un soporte de hierro para mantener el sistema fijo y finalmente se posiciona un matraz para recibir el agua que arrastra los iones.

##### **b) Procedimiento para la activación de la resina**

Según nuestro diseño de experimentos los porcentajes de catalizador elegidos son de 1,5%; 3% y 5% en peso, se sabe que según la **tabla 6 (Ver página 54)** el

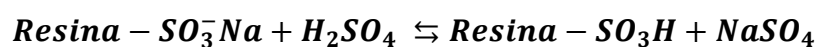
volumen de la mezcla es de 250 ml, si se lleva al peso total del sistema nos da 224,74 gramos dándonos la siguiente relación en peso.

N°	MÉTODO	CATALIZADOR %w/w	Peso gr
1	COLUMNA DE LAVADO	1.5	3.37
2	COLUMNA DE LAVADO	3	6.74
3	COLUMNA DE LAVADO	5	11.24

**Fuente:** Elaboración propia

Se pesaron las cantidades de 3,37; 6,74 y 11,24 gramos respectivamente para ser colocadas en la pera de decantación dejando una pequeña abertura para que pueda filtrar el agua destilada, luego se procederá a utilizar 500 ml de agua destilada vertiendo desde la parte superior de la bureta hasta observar que realice el arrastre de los iones de Na<sup>+</sup> de la resina por 20 minutos.

Además, se utilizó un conductímetro para verificar que el agua arrastrada en el proceso del lavado nos dé un valor cercano al de 0 *uS* (*micro-Siemens*), posteriormente se diluyó 12 ml de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (conc.) en 100 ml de agua destilada, el cual se utilizará para el intercambio de iones sódicos a ácidos.



Finalmente se dejó reposar y secar la resina a una temperatura ambiente 22°C y un tiempo de 8 horas para poder ser utilizada en la reacción de esterificación del sistema pseudo - homogéneo.