



16. GAIA

ERREAKTORE KIMIKOAK DISEINATZEKO OINARRIAK

GAI HAU IKASTEAN GAITASUN HAUEK LORTU BEHARKO DITUZU:

1. Masaren iraupen legea aplikatu.
2. Energiaren iraupen legea aplikatu.
3. Denbora espaziala kalkulatu.
4. Ekoizpenean bihurtze-mailak, emariak eta zikloaren iraupenak daukaten eragina aztertu.

Erreaktore kimikoa erreakzio kimikoak egiteko ekipoa da. Forma, tamaina eta egitura desberdinekoak izan daitezke. Instalazio edo prozesu kimikoen oinarria da, lehengaietatik abiatuz azken buruko produktu diren konposatu kimikoak han lortzen baitira.

Erreaktore kimikoaren diseinua egiteko orduan, ingeniari kimikoaren kontzeptu ugari erabiltzen dira. Adibidez, erreaktore barruko fluidodinamika diseinatzeko, mugimendu kantitatearen transferentzia nola gauzatzen den aztertu behar da; erreaktore barruko eta denboran zeharreko tenperatura-profilak kalkulatzeko, bero-transmisioa eta energiaren iraupenaren legea aplikatu behar dira; erreaktibo eta produktuen arteko nahaste-maila diseinatzeko, masa-transferentzia aztertu behar da.

Erreaktore kimikoaren funtzio nagusiak hauek dira:

- Erreaktiboaren arteko kontaktua laguntzea (fluxu mota egokia), erreakzioa gauzatzeko erreaktiboaren arteko kontaktuak ona izan behar duelako.
- Erreaktiboaren arteko kontaktu-denbora egokia eskaintzea, bihurtze-maila egokia lortzeko.
- Erreakzioa tenperatura, presio eta konposizio egokietan gauzatu ahal izatea, erreakzio-abiadura eta bihurtze-maila egokiak lortu ahal izateko.

Erreaktorearen diseinua ingeniari kimikoaren ardura da. Erreaktorearen diseinuaren helburu nagusia ekipoen tamaina kalkulatzeko da. Horretarako, hainbat faktoreren eragina dagoenez, diseinuaren ardura da agertzen diren aukeren arteko aukera egitea. Erreaktore kimikoaren diseinua egiteko orduan, aldagai hauek hartu behar dira kontuan:

- Lehengaiaren purutasuna eta konposizioa. Oso diluitua badator, erreaktorearen bolumena handia izango da, emari handiak erabili behar dituelako; oso kontzentratua badator, erreaktore isotermikoan lan egitea zaildu egin dezake, erreakzio-beroa handia izan baitaiteke.
- Prozesuaren eskala. Zein ekoizpen-mailatarako diseinatuko da? Eskala txikikoa bada (kg/egun), era ez-jarraituan lan egin dezake, eta eskala handiko ekoizpena nahi bada (t/egun), berriz, jarraian diharduten erreaktoreak komenigarriagoak dira.
- Katalizatzaile beharrik ba al dago? Erreakzio batzuk katalizatzailerik gabe oso geldoak dira, eta tamaina handiko ekipoa behar dituzte; beste batzuetan, produktu jakin bat lortzeko erreakzio hautakorra izateko katalizatzaileak erabili behar dira. Horrelakoetan, lanerako baldintza egokiak zehaztu behar dira.
- Inerteak elikatzea onuragarria al da? Sarri, tenperaturaren kontrola errazteko edo orekako bihurtze-maila handitzeko, inerteak sartzen dira erreaktorera.
- Prozesu jarraituan ala ez-jarraituan lan egitea komeni da?
- Erreaktore mota aukeratu.
- Erreaktorearen tamaina kalkulatu.
- Ingurunearekin energia trukatu beharrik dagoen aztertu. Honen arabera, erreaktore mota aukeratu daiteke.
- Birziklaziorik behar den aztertu.

- Erreaktore-irteerako nahastea bereizteko edo arazteko ekiporik behar den aztertu. Erreaktoreak bihurtze-maila handiagoz lan egiten badu, ondorengo arazte-ekipoak saihestu daitezke.
- Erreakzio-sisteman material arriskutsurik dagoen aztertu, haiekin lan egiteak baldintza bereziak eskatzen baititu.

16.1 ERREAKTORE KIMIKOEN SAILKAPENA

Erreakzio kimikoa gauzatzen den ingurune oro erreaktore kimikoa dela ohartzen bagara, mota askotakoak aurki daitezke eguneroko bizitzan. Bazkaria egiteko lapikoak, zigarroak eta berogailu katalitikoak erreaktore kimikoak dira. Industriako erreaktore kimikoak ere mota, tamaina eta forma askotakoak dira. Gainera, industria-mailako erreakzioak egiteko, hainbat erreaktore mota erabiltzen dira.

Erreaktore kimikoen sailkapena egiteko orduan, hainbat irizpide erabil daitezke. Hona hemen irizpide batzuen arabera erreaktore kimikoen sailkapenak (irizpide gehiago ere badaude, noski):

a) Erreaktorean dauden faseen arabera

Erreaktore barruan erreaktiboak eta produktuak daude aldi berean une oro. Haien faseen arabera, erreaktore **homogeneoak** (nahastea fase bakarrean dagoenean) zein **heterogeneoak** (nahastean bi fase edo gehiago daudenean) izan daitezke. Ohikoena, likido- edo gas-fasean lan egitea da, nahiz eta solido-egoerako erreakzio batzuk egon badauden.

b) Eragiketaren arabera

Irizpide honen arabera, erreaktoreak **ez-jarraituak**, **jarraituak** edo **tartekoak** izan daitezke. Lehen motako erreaktoreak ekoizpen-maila txikietarako aproposak dira, eta laborategian erabiltzen dira erreakzio kimikoen ekuazio zinetikoak lortzeko. Erreaktore jarraituak, aldiz, ekoizpen-maila handietarako aproposak dira, eta produktuaren uniformetasuna bermatzen dute. Tarteko erreaktoreak erreakzio finkatu batzuetarako erabiltzen dira, eta eskala handikoak (altzairugintza) zein txikikoak (jakien ekoizpena) izan daitezke.

c) Nahaste motaren arabera

Irizpide honen arabera, erreaktoreak **tanga-erakoak** edo **hodi-formakoak** izan daitezke. Lehen motako erreaktorean, nahaste osoa ondo nahasita dago, horretarako irabiatzaileak erabiltzen baitira. Hodi-formako erreaktoreetan, aldiz, ez da nahasterik gertatzen jarioaren norabidean.

d) Bero-trukearen arabera

Erreaktore kimikoak **isotermikoak** dira erreaktore osoko temperatura konstante mantentzen bada. Erreaktorearen hormak ingurunearekiko termikoki isolatuta badaude, erreaktore **adiabatikoa** dela esaten da. Erreaktoreak ingurunearekin beroa trukatzeko bada baina isotermikotasunari eutsi gabe, **ez-adiabatikoa eta ez-isotermikoa** dela esaten da.

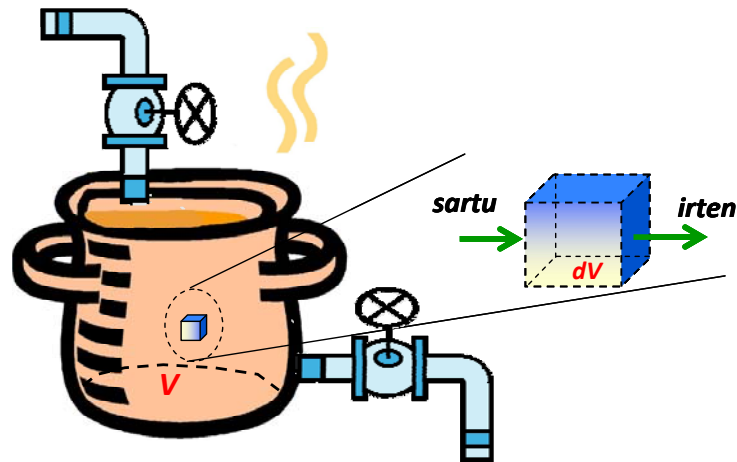
e) Katalizatzaileen erabileraren arabera

Erreakzio kimiko asko ezin dira gauzatu katalizatzailerik gabe baldintza normaletan, erreakzio-abiadura oso motela baitute edo hautakortasun eskasa baitute. Katalizatzailerik gabe diharduten erreaktore kimikoei erreaktore **homogeneo** deritze. Aldiz, katalizatzaileak erabiltzen dituzten erreaktore kimikoak erreaktore **katalitikoak** dira.

16.2 ERREAKTORE KIMIKOEN OINARRIZKO EKUAZIOAK

Erreaktore kimikoetan, beste sistemetan bezala, mugimendu kantitatearen, masaren eta energiaren iraupenaren legeak betetzen dira. Ondoren, masaren eta energiaren iraupenaren lege orokorrak azalduko dira.

16.2.1 Masaren iraupenaren legea



16.1 irudia. Nahastearen dV bolumen-elementua masaren iraupenaren legerako.

Demagun V bolumeneko erreaktore osoaren zati txiki bat, dV bolumen-elementua, eta erreaktorean erreaktibo eta produktuen nahastea dagoela (16.1 irudia). A osagaia erreakzioan parte hartzen duen konposatu kimikoa bada, masa-balantze hau dagokio¹:

$$\left(\begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{METATZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{SARTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenera} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{IRTETE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenetik} \end{array} \right) \pm \left(\begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{SORTZE/DESAGERTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{array} \right)$$

$$\frac{dN_A}{dt} = F_{A,sartu} - F_{A,irten} - (-r_A) \cdot dV \quad (16.1)$$

A osagaia erreaktibo bada, desagertu egingo da dV bolumen-elementuan; produktua bada, aldiz, sortu egingo da. Horregatik, desagertzen denean zeinu negatiboa (-) erabiliko da, eta sortzen denean, berriz, zeinu positiboa (+) erabili behar da.

Adierazpen orokor hori erreaktore mota guztientzat betetzen da. Hala ere, kasu partikular batzuk aipatuko dira:

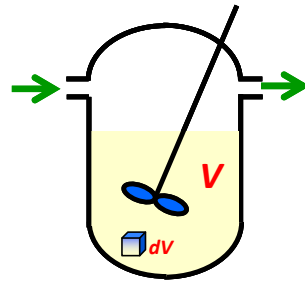
Erreaktore ez-jarraitua bada: Sartu = Irten = 0 izango lirateke.

Egoera geldikorrean badihardu: Metatzea = 0 da.

16.2.1.1 Nahaste-erreaktore idealak

Erreaktoreko nahastea irabiatzaile batez oso ondo nahasia mantentzen bada, jo daiteke erreaktore osoko kondizioak berdina direla. Hau da, erreaktoreko dV bolumen-elementu guztietan tenperatura eta kontzentrazioa berdina denez, erreakzio-abiadura ere berdina da, eta, ondorioz, masa-balantzea erreaktore osoari (V) egin dakioke.

¹ Ohar gaitezen 4.1 atalean ikusitako adierazpen dela, beste era baten moldatuta egon arren.



16.2 irudia. Nahaste-erreaktore ideala.

16.2.1.2 Hodi-formako erreaktore idealak

Nahastea erreaktorea den hodian aurrera doan heinean, konposizioa eta temperatura aldatu egiten dira. Horregatik, masa-balantzea egiteko orduan, erreaktoreko zati txiki bat aukeratu behar da, dV .

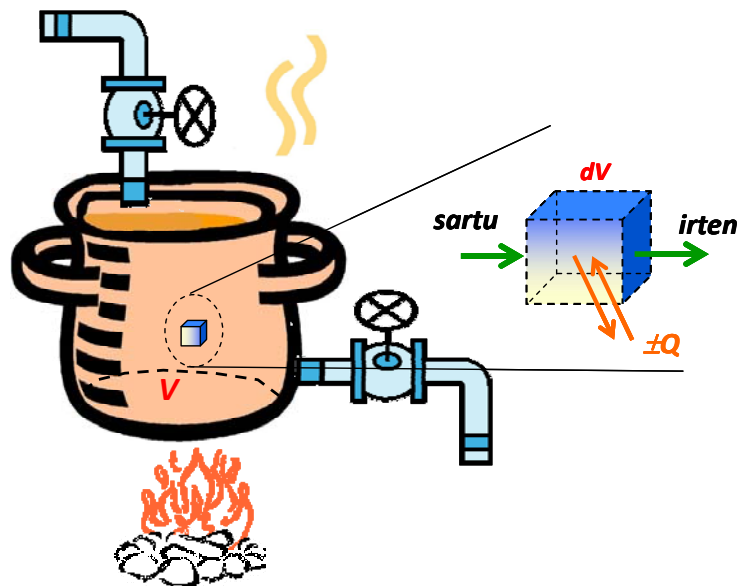


16.3 irudia. Hodi-formako erreaktore ideala.

Masaren iraupenaren legea, beraz, dV bolumen elementuari dagokion zatian egin behar da, eta erreaktorearen bolumen osora hedatu behar da integralaren bidez.

16.2.2 Energiaren iraupenaren legea

Ohiko erreaktore kimikoetan energiaren iraupenaren legea aztertzean, energia mekanikoaren terminoak (zinetikoa, potentziala eta lana) arbuigarriak dira termino entalpikoen aldean. Horregatik, energia entalpikoen iraupenaren legea erabiltzen da:

16.4 irudia. Nahastearen dV bolumen diferentziala energiaren iraupenaren legerako.

$$\left(\begin{array}{c} \text{energiaren} \\ \text{METATZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{energiaren} \\ \text{SARTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenera} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{energiaren} \\ \text{IRTETE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenetik} \end{array} \right) \\ \pm \left(\begin{array}{c} \text{energiaren} \\ \text{SORTZE/XURGATZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{array} \right) \pm \left(\begin{array}{c} \text{energiaren} \\ \text{TRUKATZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{array} \right)$$

$$\text{Energia/t} \quad \frac{dE}{dt} = (F \cdot C_p)_{\text{sartu}} \cdot T_{\text{sarrera}} - (F \cdot C_p)_{\text{irten}} \cdot T_{\text{irteera}} + (-\Delta H_r) \cdot (-r_A) \cdot dV \pm Q \quad (16.2)$$

Adierazpen orokor honetan, sarrerako eta irteerako terminoak masa-jarioarekin sartzen eta irteten diren entalpiak dira. Sortze-/Xurgatze-terminoari dagokionez, erreakzio kimikoa exotermikoa bada, zeinu positiboa (+) erabiliko da (beroa sortzen baita), eta zeinu negatiboa (-) erabiliko da endotermikoa denean (beroa xurgatzen baitu). Azkenik, ingurunearekin bero-trukagailuen bitartez trukutzen duen beroa zenbatzen du trukatzeko-terminoak, eta (+) zeinua dauka berotu egiten denean eta (-) hoztu egiten denean.

dV bolumen-elementuan energia hau sortzen edo xurgatzen da erreakzio kimikoagatik:

$$(-\Delta H_r) \cdot (-r_A) \cdot dV \quad (16.3)$$

Masarekin gertatzen den moduan, kasu partikularrak izan daitezke:

Erreaktore ez-jarraitua bada: Sartu = Irten = 0.

Egoera geldikorrean badihardu: Metatzea = 0.

Erreaktore adiabatikoa bada, Trukatzea = 0.

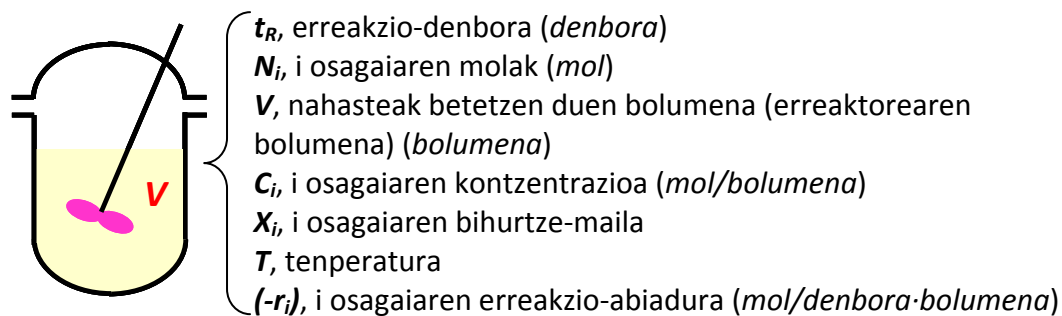
16.3 ERREAKTOREAK DISEINATZEKO ALDAGAIK

Erreakzio kimiko bat bihurtze-maila finkatu bateraino irits dadin erreaktoreak izan behar duen tamaina kalkulatzeko da erreaktore-diseinuaren helburu nagusia, betiere elikadura, temperatura eta kondizio finkatu batzuetan lan eginez.

Erreaktoreak diseinatzean, ezinbestekoa da bertan egiten diren erreakzio kimikoen ekuazio zinetikoa ezagutzea, masa- zein energia-balantzeetan agertzen baita termino hori. Aldagai horretaz gainera, beste batzuk ere jakin behar dira erreaktorea diseinatzeko. Ondoren azalduko dira erreaktore ez-jarraitu eta jarraituak diseinatzeko erabiltzen diren diseinu-aldagaiak.

16.3.1 Erreaktore ez-jarraitua

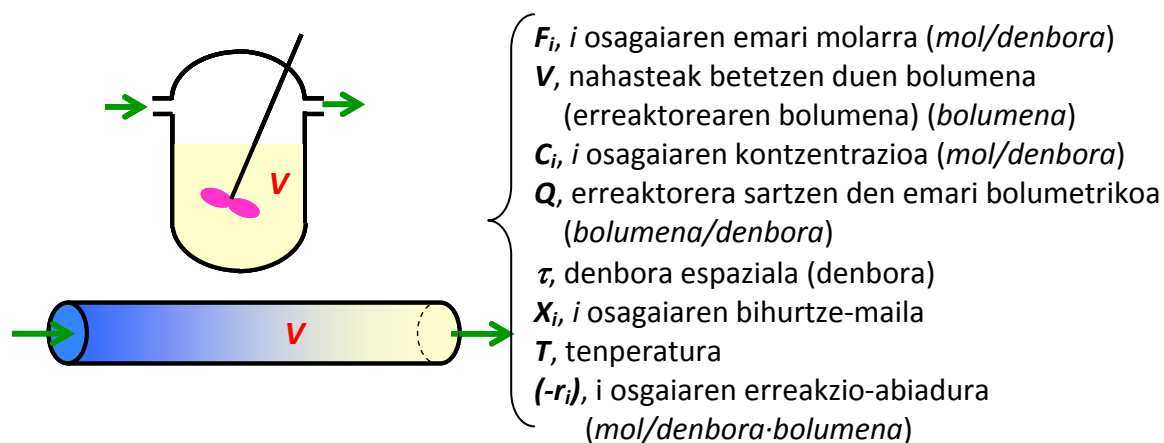
Erreaktore mota honen ezaugarri nagusia da ez duela egoera geldikorrean lan egiten. Hori dela eta, diseinuko aldagai garrantzitsuena erreakzio-denbora da. Era ez-jarraituan diharduen erreaktore mota ohikoena nahaste-erreaktore ez-jarraitua da. Erreaktore honen diseinuan erabili beharreko aldagaiak 16.5 irudian agertzen dira.



16.5 irudia. Erreaktore ez-jarraitua diseinatzeko erabiltzen diren aldagaiak.

16.3.2 Erreaktore jarraitua

Erreaktore jarraituak egoera geldikorrean erabiltzen dira (hasierako eta amaierako aldiak salbuespenak dira). Erreaktore jarraituen muturreko bi konfigurazioak nahaste-erreaktoreak eta hodi-formako erreaktoreak dira. 16.6 irudian agertzen dira erreaktore jarraituen eskema, eta diseinuan erabiltzeko aldagaiak.



16.6 irudia. Erreaktore jarraituak diseinatzeko erabiltzen diren aldagaiak.

Erreaktore jarraituan, erreaktorera sartzen den korrantearen osagai bakoitzaren emari molarra (F_i) osagaiaren kontzentrazioaren (C_i) eta emari bolumetrikoko osoaren (Q) arabera idatz daiteke:

$$F_i \left(\frac{\text{mol}}{t} \right) = C_i \left(\frac{\text{mol}}{\text{bol}} \right) \cdot Q \left(\frac{\text{bol}}{t} \right) \quad (16.4)$$

Aipagarria da erreaktore jarraituen egoera geldikorreko eragiketan ez duela zentzurik denbora kronologikoa (t) erabiltzeak. Aldagai horren ordez, denbora espazial (τ) izeneko aldagaia erabiltzen da.

$$\tau = \frac{V}{Q} \quad (16.5)$$

Nahasteak betetzen duen V bolumenaren eta erreaktorera sartzen den Q emari bolumetrikoko arteko erlazioa da denbora espaziala (sarrerako T eta P kondizioetan neurtuak). Erreaktorearen bolumen bereko elikadura tratatzeko beharko litzatekeen denbora da denbora espaziala. Adibidez, 30 min-ko denbora espazialak adierazten du erreaktorearen bolumenaren adinako elikadura-bolumena tratatu dela 30 minutuan.

Erreaktore jarraituetan jarioak erabiltzen direnez, bihurtze-maila era honetan definitzen da:

$$X_A = \frac{F_{A,0} - F_A}{F_{A,0}} \quad (16.6)$$

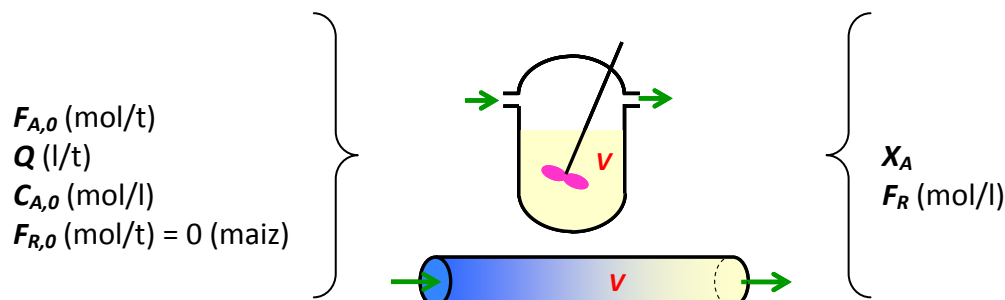
16.1 EKOIZPENA

Denbora unitateko produktuaren kantitate bat lortzea edo lehengai desagertzea izan daiteke erreaktore kimikoen helburua. Lehenengo kasuaren adibideak (produktua ekoizten duten prozesuak) azido sulfurikoa edo metanola ekoizteko erreaktoreak izan daitezke. Osagai kutsatzaile bat erreakzio kimikoz desagerrarazi nahi denean (adibidez, lindanoaren eliminazioa), helburu nagusia erreaktiboa desagertzea da. Erreaktibo eta produktuak erreakzioaren estekiometriaz lotuta daudenez, aurrerantzean, sortzen ari den produktuarekiko definituko da erreaktorearen ekoizpena.

$aA \rightarrow rR$ erreakzio sinplearentzat, erreaktorean denbora-tarte batean (1 ordu, 1 egun, 1 urte...) lortu den R produktu kantitatea (mol edo masa) da R produktuaren **ekoizpena** (P_R).

16.4.1 Ekoizpena erreaktore jarraituan

Erreaktore jarraituan, produktuz aberatsa den korrontea irteten da une oro erreaktoretik. Horregatik, R-ren **ekoizpen-abiadura** (F_R) erabiltzen da, denbora-unitateko lortzen den ekoizpena, alegia. Δt denbora-tarteko R-ren ekoizpena, berriz, P_R bezala adierazten da.



16.7 irudia. Erreaktore jarraituko R produktuaren ekoizpen-abiadura eta Δt tarteko ekoizpena kalkulatzeko aldagaiak.

Erreaktore jarraituan R produktuaren ekoizpen-abiadura honela kalkulaten da:

$$F_R \left(\frac{\text{mol}}{t} \right) = F_{R,0} + \left(\frac{r}{a} \right) \cdot F_{A,0} \cdot X_A = F_{R,0} + \left(\frac{r}{a} \right) \cdot Q \cdot C_{A,0} \cdot X_A \quad (16.7)$$

Δt tarteko ekoizpena, berriz:

$$P_R (\text{mol}) = \Delta t \cdot \left[F_{R,0} + \left(\frac{r}{a} \right) \cdot Q \cdot C_{A,0} \cdot X_A \right] \quad (16.8)$$

Adibidea 16.1 adibidea

Erreaktore jarraitu batera 1000 l/h erreaktibo sartzen da, $C_{A0} = 2$ mol/l izanik. $A \rightarrow 2R$ erreakzioa gertatzen da R produktua ekoizteko. Erreaktorearen irteeran $X_A = 0,70$ neurtzen bada, kalkula ditzagun (a) R-ren ekoizpen-abiadura; (b) egun bakoitzeko R-ren ekoizpena.

Ebazpena

(a) Lehenik eta behin, elikadura-korronteko A lehengaiaren emari molarra kalkulatu da:

$$F_{A_0} = Q \cdot C_{A_0} = 1000 \cdot 2 = 2000 \text{ mol/h}$$

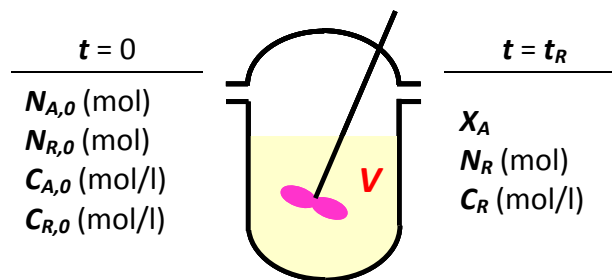
Erreakzioaren estekiometria kontuan hartuta, hau da R produktuaren emari molarra (ekoizpen-abiadura) erreaktore-irteeran:

$$F_R = F_{R_0} + 2 \cdot F_{A_0} \cdot X_A = 2 \cdot 2000 \cdot 0,7 = 2800 \text{ mol/h.}$$

(b) Egun oso batean lortzen den R-ren ekoizpena $P_R = 2800 \cdot 24 = 67,2 \text{ kmol}$ da.

16.4.2 Ekoizpena erreaktore ez-jarraituan

Erreaktore ez-jarraituaren eragiketa ziklikoa da, hau da, kargaka dihardu. Hori dela eta, **zikloko ekoizpena** ($P_{Z,R}$) erabiltzen da ekoizpena adierazteko. Halaber, Δt denbora-tartean N ziklo gauzatu badira, tarte horretako ekoizpena N ren arabera kalkulatu da.



16.8 irudia. Erreaktore ez-jarraituko R produktuaren zikloko ekoizpena eta Δt tarteko ekoizpena.

Zikloko R-ren ekoizpena:

$$P_{Z,R} \left(\frac{\text{mol}}{\text{ziklo}} \right) = N_{R,0} + \left(\frac{r}{a} \right) \cdot N_{A,0} \cdot X_A = N_{R,0} + \left(\frac{r}{a} \right) \cdot V \cdot C_{A,0} \cdot X_A \quad (16.9)$$

Δt tartean R-ren ekoizpena, N ziklo burutu badira:

$$P_R \text{ (mol)} = N_{R,0} + N \cdot \left(\frac{r}{a} \right) \cdot N_{A,0} \cdot X_A \quad (16.10)$$

Adibidea 16.2 adibidea

Erreaktore ez-jarraitu batera 1000 mol A sartzen dira, $A \rightarrow 2R$ erreakzioaren bidez R produktua ekoizteko. $X_A = 0,70$ izan arte lanean dihardu (4 h). Une horretan, erreaktorea hustu egiten da, garbitu eta berriro bigarren ziklo bat hasten da; 2 h-ko denbora-hila izan du. Kalkula ditzagun (a) ziklo bakoitzeko R-ren ekoizpena; (b) egun bakoitzeko R-ren ekoizpena.

Ebazpena

(a) Ziklo baten amaieran erreaktorean dagoen R:

$$N_R = N_{R_0} + 2 \cdot N_{A_0} \cdot X_A = 2 \cdot 1000 \cdot 0,7 = 1400 \text{ mol da.}$$

Beraz, $P_{Z,R} = 1400 \text{ mol/ziklo}$

(b) Ziklo bakoitzaren iraupena 6 h da: erreakzioak 4 h irauten du. Denbora hila 2 h-koa da. Beraz, zikloak 6 h irauten badu, egun osoan (24 h) 4 ziklo oso betetzen dira.

Horrela, $P_R = 4 \cdot 1400 = 5600 \text{ mol/egun-eko ekoizpena}$ lortzen da.