



# TÓPICOS SELECTOS de CIENCIAS QUÍMICAS

*Coordinador* Leobardo Manuel **Gómez Oliván**



**TÓPICOS SELECTOS**  
**de CIENCIAS**  
**QUÍMICAS**



**Universidad Autónoma  
del Estado de México**

Dr. en Ed. Alfredo Barrera Baca  
*Rector*

Dr. en C.I. Amb. Carlos Eduardo Barrera Díaz  
*Secretario de Investigación y Estudios Avanzados*

Dr. en C. Erick Cuevas Yañez  
*Director de la Facultad de Química*

Mtra. en Admón. Susana García Hernández  
*Directora de Difusión y Promoción de la Investigación  
y los Estudios Avanzados*

# **TÓPICOS SELECTOS** **de CIENCIAS** **QUÍMICAS**

Leobardo Manuel Gómez Oliván  
*Coordinador*



**Universidad Autónoma  
del Estado de México**

# TÓPICOS SELECTOS de CIENCIAS QUÍMICAS

2a edición impresa, abril 2018  
1a edición para Internet, abril 2018

ISBN: 978-607-422-928-8  
ISBN versión digital: 978-607-422-929-5

D. R. © Universidad Autónoma del Estado de México  
Instituto Literario núm. 100 ote.  
Centro, C.P. 50000,  
Toluca, Estado de México  
<http://www.uaemex.mx>

Este libro cuenta con el aval de dos pares externos.

El contenido de esta publicación es responsabilidad de los autores.

En cumplimiento del Reglamento de Acceso Abierto de la Universidad Autónoma del Estado de México, la versión digital de esta obra se pone a disposición del público en el repositorio de la UAEM (<http://ri.uaemex.mx>) para su uso en línea con fines académicos y no de lucro, por lo que se prohíbe la reproducción parcial o total, directa o indirecta del contenido de esta presentación impresa sin contar previamente con la autorización expresa y por escrito de los editores, en términos de lo así previsto por la *Ley Federal del Derecho de Autor* y, en su caso, por los tratados internacionales aplicables.

Impreso y hecho en México

# Índice

Prólogo.....	11
I. Comparación de tratamientos electroquímicos en la remoción de fenol.....	13
Rosalinda Marín Nava, Gabriela Roa Morales, Reyna Natividad Rangel, Jaime Espino Valencia y Rubí Romero Romero	
II. Configuraciones alternas de un reactor con intercambio de calor y membranas por simulación .....	39
Ángel Bautista Delgado, Armando Ramírez Serrano, Rubí Romero Romero y César Pérez Alonso	
III. Estudio económico de una columna de absorción para la captura de CO <sub>2</sub> emitido en una planta termoeléctrica.....	59
Vidal Morales Mercado, Rosa Hilda Chávez Torres, Rubí Romero Romero y Reyna Natividad Rangel	
IV. Preparación de catalizadores heterogéneos de sodio soportados en zeolita NaX para la obtención de biodiesel .....	81
Sandra Luz Martínez Vargas, Rubí Romero Romero, Reyna Natividad Rangel y Víctor Sánchez Mendieta	
V. Recubrimiento de monolitos con LaMnO <sub>3</sub> /γ-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .....	101
María del Carmen Zepeda Mondragón, Reyna Natividad Rangel, Ramón Montiel López, Armando Ramírez Serrano, Rosa María Gómez Espinosa	
VI. Estabilidad térmica oxidativa de un sistema nutracéutico incorporando aceite esencial de chía ( <i>Salvia hispanica</i> L.) y ácido ascórbico en emulsiones dobles.....	121
Héctor Carrillo Navas, Julián Cruz Olivares, Juan Orozco Villafuerte, Eleazar Aguirre Mandujano y César Pérez Alonso	
VII. Purificación de un antígeno recombinante de hepatitis E expresado en <i>Hansenula polymorpha</i> .....	139
Abraham Álvarez García, Jorge Javier Ramírez García y Néstor Octavio Pérez	

VIII. Estrés oxidativo producido por antiinflamatorios no esteroideos sobre el bioindicador <i>Hyalella azteca</i> .....	181
Leobardo Manuel Gómez Oliván, Marcela Galar Martínez, Nadia Neri Cruz, Hariz Islas Flores, Arturo Colín Cruz, Patricia Vieyra Reyes, Nely San Juan Reyes, Octavio Dublán García y Leticia Xóchitl López Martínez	
IX. Evaluación de la utilización de herceptin® (Traztuzumab) como tratamiento adyuvante de cáncer de mama tipo HER2 en el Centro Oncológico Estatal del ISSEMYM.....	213
Gerardo Daniel Miranda Mendoza, Leobardo Manuel Gómez Oliván, Marcela Galar Martínez, Paula Anel Cabrera Galeana, Patricia Vieyra Reyes, Octavio Dublán García y Leticia Xóchitl López Martínez	
X. IMC, niveles de adiponectina E IL-6 como factores interrelacionados en la carcinogénesis mamaria, implicación de la vía de señalización de leptina y adiponectina en la respuesta al tratamiento.....	245
Jonnathan Guadalupe Santillán Benítez, Juan Juventino Torres Juárez, Hugo Mendieta Zerón y Leobardo Manuel Gómez Oliván	
XI. Farmacología de la nicotina y sus efectos en el sistema nervioso central.....	265
Patricia Vieyra Reyes, Clementina Jiménez Garcés, Margarita Hernández González y Leobardo Manuel Gómez Oliván	
XII. Actividad antioxidante <i>in vitro</i> e <i>in vivo</i> del extracto acuoso de pèrsimo ( <i>Diospyros kaki</i> L.), maracuyá ( <i>Passiflora edulis</i> var Sims) y flor de jamaica ( <i>Hibiscus sabdariffa</i> L.).....	295
Tania Andrómeda Romero Herrera y María Dolores Hernández Navarro	
XIII. Cinética del daño al DNA por la incorporación del radiofármaco <sup>99m</sup> Tc-N <sub>2</sub> S <sub>2</sub> -TAT (49-57) Lys3-BN empleando el ensayo cometa en linfocitos humanos.....	313
Myrna Alejandra Luna Gutiérrez, Julieta Castillo Cadena, Guillermina Ferro Flores y Rafael Valencia Quintana	

- XIV. Polimorfismos de la glutatión S-transferasa GSTM1 y GSTT1 en leucemia aguda y la respuesta al tratamiento, utilidad del meta-análisis..... 335  
Jonnathan Guadalupe Santillán Benítez y Julieta Castillo Cadena
- XV. Estudio de la reactividad de hidruros de aluminio estéricamente protegidos con moléculas pequeñas insaturadas..... 361  
Mónica Mercedes Moya Cabrera, Vojtěch Jančík, Rosa María Gómez Espinosa y Telésforo Jesús Morales Juárez
- XVI. Formación y estructura cristalina de dos diferentes compuestos a partir de la sulfonación de trifenilestibina..... 381  
Rosa María Gómez Espinosa, Iván García Orozco, Marisol Reyes Lezama, Fernando Cortés Guzmán, Mónica Mercedes Moya Cabrera, Vojtěch Jančík y Telesforo Jesús Morales Juárez
- XVII. Síntesis de un análogo de AZT, un compuesto anti-HIV ..... 397  
Davir González Calderón, Carlos Augusto González González, Aydeé Fuentes Benítes, Erick Cuevas Yáñez, David Corona Becerril y Carlos González Romero
- XVIII. Uso de la reacción de Heck en la síntesis de compuestos orgánicos mediada por microondas..... 415  
Ana María Llaguno Rueda, Erick Cuevas Yáñez, Aydeé Fuentes Benites, Carlos González Romero y David Corona Becerril





## PRÓLOGO

**L**a Química es una de las ramas de la ciencia que ha tomado mayor importancia en las últimas décadas. Es imposible no pensar en ella al escuchar los avances milagrosos de fármacos, materiales inteligentes, tecnología nanométrica, computadoras cuánticas o procesos catalíticos, donde la transformación controlada de la materia ha logrado la creación de sustancias con propiedades hechas a medida. En ese sentido, el papel de la Facultad de Química, en la formación de profesionales de dicha área, cobra una importancia superlativa; además del compromiso y la responsabilidad de formar sujetos no sólo con conocimiento, sino desarrollar su conciencia social y ecológica, indispensables para la situación actual y futura.

El Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas de la Facultad de Química UAEM está consciente de dichos compromisos, y con el fin de reforzar la formación de nuestros estudiantes presenta *Tópicos Selectos de Ciencias Químicas*. Este libro es un ejercicio formal de escritura de los resultados de investigación que, de acuerdo con el Reglamento de los Estudios Avanzados de la Universidad Autónoma del Estado de México, forma parte importante del proceso para obtener el grado en la modalidad de tesis por capítulo para libro. Por ello en cada capítulo se ha seguido una evaluación rigurosa de los contenidos, en un formato académico como el utilizado en las editoriales de mayor prestigio científico.

Los capítulos contenidos en este ejemplar reflejan la actividad académica desarrollada por los alumnos e investigadores asociados al Posgrado en las diferentes áreas de acentuación que lo integran: Ingeniería Química, Química Analítica, Químico Biológica, Química Inorgánica y Química Orgánica.

El área de Ingeniería Química presenta una comparación de tratamientos electroquímicos en la remoción de fenol, un estudio de la configuración alterna de un reactor con intercambio de calor y membranas por simula-

ción, el estudio económico de una columna de absorción para la captura de CO<sub>2</sub> emitido en una planta termoeléctrica, la preparación de catalizadores heterogéneos de sodio soportados en zeolita NaX para la obtención de biodiesel, el estudio de recubrimiento de monolitos con LaMO<sub>3</sub> / γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, así como el estudio de la estabilidad térmica oxidativa de un sistema nutracéutico incorporando aceite esencial de chía (*Salvia hispanica* L.) y ácido ascórbico en emulsiones dobles.

El área de Química Analítica presenta el estudio de la purificación de un antígeno recombinante de hepatitis E expresado en *Hansenula polymorpha*.

En el área de acentuación Químico Biológica, se presentan estudios de estrés oxidativo producido por antiinflamatorios no esteroideos sobre el bioindicador *Hyalella azteca*; la evaluación del uso de Herceptin® (Traztuzumab) como tratamiento adyuvante de cáncer de mama tipo HER2 en el Centro Oncológico Estatal del ISSEMYM; el estudio de los niveles de adiponectina e IL-6 como factores interrelacionados en la carcinogénesis mamaria; implicación de la vía de señalización de leptina y adiponectina en la respuesta al tratamiento, una revisión de la farmacología de la nicotina y sus efectos en sistema nervioso central; el estudio de la actividad antioxidante *in vitro* e *in vivo* del extracto acuoso de pèrsimo (*Diospyros kaki* L.), maracuyá (*Passiflora edulis* var *Sims*) y flor de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.); la cinética del daño al DNA por la incorporación del radiofármaco <sup>99m</sup>Tc-N2S2-TAT (49-57) Lys3-BN empleando el ensayo cometa en linfocitos humanos; así como los polimorfismos de la Glutación S-Transferasa GSTM1 y GSTT1 en leucemia aguda y la respuesta al tratamiento, utilidad del meta-análisis.

El área de Química Inorgánica presenta el estudio de la reactividad de hidruros de aluminio estéricamente protegidos con moléculas pequeñas insaturadas, así como la formación y estructura cristalina de dos diferentes compuestos a partir de la sulfonación de trifenilestibina.

Las investigaciones del área de Química Orgánica son la síntesis de un análogo de AZT, un compuesto anti-HIV, y el uso de la reacción de Heck en la síntesis de compuestos orgánicos mediada por microondas.

Dejamos ahora en manos del lector los comentarios finales sobre esta edición, esperando contribuir en el área de la Química con aportaciones de interés para el desarrollo de cada una de las áreas de acentuación de nuestro Posgrado.

## Capítulo II

### **Configuraciones alternas de un reactor con intercambio de calor y membranas por simulación**

Ángel Bautista Delgado<sup>1\*</sup>  
Armando Ramírez Serrano<sup>1</sup>  
Rubí Romero Romero<sup>2</sup>  
César Pérez Alonso<sup>1</sup>



## 1. Introducción

**E**n la actualidad y debido al gran avance científico y tecnológico, en la ingeniería química en el campo de ingeniería de reactores, se han diseñado reactores cada vez más novedosos para llevar a cabo reacciones altamente exotérmicas de una manera más controlada en su operación y con una disminución significativa en la emisión de efluentes contaminantes al medio ambiente.

En nuestros días, el empleo de reactores multitubulares para reacciones de oxidación parcial continua vigente ya que, debido a su configuración espacial, se pueden lograr buenos controles de temperatura eficientes en reacciones muy exotérmicas; sin embargo, aun presentan algunas deficiencias en cuanto al consumo energético y el control de adición de los reactivos al reactor.

Por otro lado, en las últimas décadas se ha incrementado el uso de reactores con membrana con aplicaciones en reacciones de oxidación parcial, pero solamente a nivel laboratorio, permitiendo alcanzar mejores controles de adición de reactivos en el lecho catalítico, no así de la temperatura de reacción. Una de las ventajas de usar reactores con membrana es alcanzar incrementos en la conversión, las cuales sido comprobados por una gran cantidad de investigadores, y además han hecho evidente los potenciales beneficios económicos de su implementación industrial (Zaspalis y Burggraaf, 1991; Zaman, 1994, Saraco *et al.*, 1999; Dittmeyer *et al.*, 2001; Dixon, 2003; Seidel-Morgenstern, 2005). Algunas de las aplicaciones más

importantes de las membranas corresponden a las separaciones de compuestos orgánicos y deshidrogenaciones de hidrocarburos como la del ciclohexano, etilbenceno, metano, etano, propano (Tiscareño, 1996; Isamil, 2001; Saucedo, 1999) y reacciones de oxidaciones parciales como el etano, metano (O'Neil, 2006) y etileno (Donsi *et al.*, 2005).

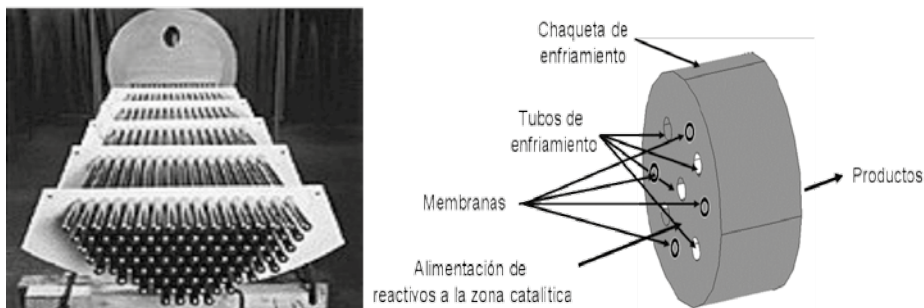
Para lograr alcanzar mejores rendimientos y conversiones, se han propuesto nuevas alternativas de diseño de reactores novedosos, considerando las ventajas que presentan los reactores tubulares y con membrana. El diseño de éste es considerar un reactor con intercambio de calor y membranas, donde el catalizador se encuentra en la coraza y algunos tubos permiten la adición controlada de reactivos (membranas) y otros de enfriamiento (Ramírez, 2007). En este capítulo se presenta una investigación que permita encontrar las mejores configuraciones para alcanzar las mejores conversiones y rendimientos por arriba de los reactores convencionales.

Para llevar a cabo la simulación del reactor con intercambio de calor y membranas, se eligió la reacción de oxidación parcial del etileno para la obtención de óxido de etileno. La producción de este intermedio tiene una gran importancia industrial, ya que se emplea como materia prima para la producción de un gran número de productos químicos principalmente en el área textil, farmacéutica y tensoactivos. La participación en la producción del óxido de etileno en la industria mexicana representa el 5% respecto a la producción mundial que fue en el 2010 de 19 millones de toneladas, y es una oportunidad para incidir en la participación en este proceso.

### **1.1. Reactor con intercambio de calor y membranas**

En los trabajos presentados en el AMIDIQ (Ramírez, 2004 y 2005), se contempló la derivación de un modelo para la simulación del diseño de un reactor de lecho empacado, cuya configuración es similar a la de un intercambiador de calor, donde el catalizador se encuentra empacado por el lado de la coraza y rodeado de tubos para la transferencia de calor y la adición controlada de reactivo. En la figura 1 se presenta un esquema donde se representa el reactor modelo.

Figura 1. Esquema del reactor con intercambio de calor y membranas

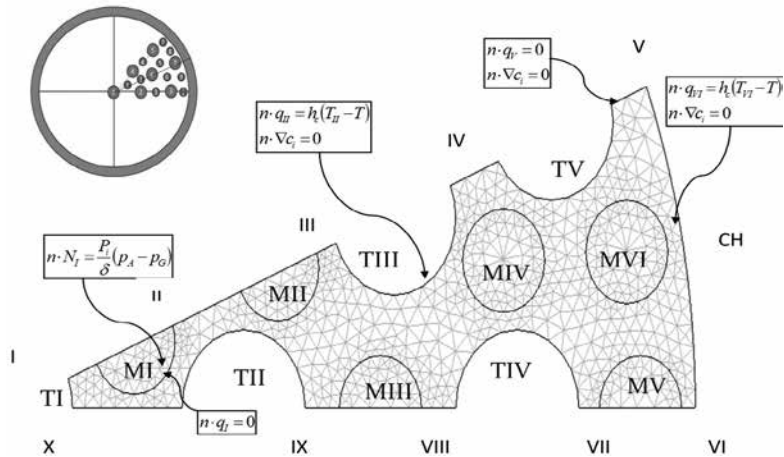


Las diferentes configuraciones del reactor se basaron en el modelo propuesto por Tiscareño Ramírez (2009), la cual se inició con la distribución de 13 tubos; 9 tubos de membrana y 4 de enfriamiento. En este capítulo se muestra el escalamiento a 25, 49, 97 y 137 tubos buscando con ellos la mejor distribución y configuración con la finalidad de obtener las mejores conversiones y rendimientos, además de evitar la formación de puntos calientes y lograr un mejor control de la temperatura mediante la modificación de diámetros de los tubos y flujos de alimentación de oxígeno y etileno.

Las dimensiones del reactor se mantuvieron constantes, con un diámetro de 10 cm y una longitud de 50 cm. Se presentan tres zonas en el reactor: a) zona de reacción (coraza), donde se encuentra empacado el catalizador; b) zona de adición controlada del reactivo (membranas); y c) zona de las interfases de intercambio de calor (enfriamiento). En la figura 2 se presenta un dieciseisavo de la parte frontal del reactor, cuya distribución consiste de 97 tubos; 64 corresponden a las membranas y 33 de enfriamiento, con diámetros de 6 mm y 9 mm respectivamente.



Figura 2. Malleo y condiciones fronteras para una unidad simétrica del modelo



Las condiciones de frontera son presentadas en la figura 2, donde los datos de MI a MVI corresponden a las membranas, las condiciones de TI a TV a los tubos de enfriamiento, a la chaqueta la condición VI y las condiciones de la I hasta la XI a las de simetría.

La temperatura del fluido en el interior de cada tubo y chaqueta del reactor varía en dirección axial y se considera un perfil unidimensional axial de temperatura dentro de cada tubo de enfriamiento; la misma consideración es tomada en cuenta para las membranas.

Para el mejor desarrollo del modelo se consideraron las siguientes suposiciones:

- La velocidad superficial varía con la posición axial, pero es independiente de la radial y angular.
- La dispersión y la conductividad axial son despreciables en comparación a la magnitud de los términos convectivos.
- Los coeficientes radiales de transporte de difusividad efectiva y conductividad efectiva se suponen constantes.
- El coeficiente de película de transferencia de calor,  $h_c$ , se considera constante para cada tubo y de la chaqueta durante la simulación.

- La membrana se considera selectiva a uno de los reactivos; inerte y distribuye el reactivo en dirección axial del lecho catalítico.
- Se desprecia las resistencias internas y externas de transferencia de masa.
- El sistema se supone en estado estacionario.

### Balance de masa en la cámara de reacción (Coraza).

$$\frac{\partial N_i}{\partial z} = \frac{D_e}{u_s} \left( \frac{\partial^2 N_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N_i}{\partial y^2} \right) - \rho_B r_{p_i} \quad (1)$$

### Balance de energía en la cámara de reacción (Coraza).

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k_e}{u_s \rho c_p} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - \sum \frac{\rho_B (-\Delta H_r) r_{p_r}}{u_s \rho c_p} \quad (2)$$

Donde  $N_i = u_s C_i$  es el flux molar del componente  $i$ , el subíndice  $r$  se refiere a la reacción independiente y  $r_p$  es la velocidad de reacción catalítica la cual incluye las resistencias externas e internas.

**Balance de masa en las membranas.** Debido a que los perfiles de concentración en el tubo de membrana dependen de la posición, es necesario incluir el balance de masa para esta región, sin término de reacción:

$$\left( \frac{\partial G_i}{\partial z} \right)_k = \frac{D_m}{u_m} \left( \frac{\partial^2 G_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 G_i}{\partial y^2} \right) \quad (3)$$

Donde  $G_i$  es el flux molar de oxígeno y  $k$  es el número de membrana dentro de la unidad de simetría.

Las condiciones de frontera se muestran en la figura 2 y describen a continuación:

**Frontera en tubos de transferencia de calor.** Las fronteras TI, TII, TIII y TIV corresponden a las fronteras donde el flux de calor conductivo de la zona

de reacción es igual al flux convectivo del fluido de enfriamiento. En estas fronteras no existe transferencia de masa.

$$n \cdot q_l = hc \cdot (T_l - T) \quad (4)$$

$$n \cdot \nabla C_i = 0 \quad (5)$$

Donde el subíndice  $l$  representa el número de frontera e  $i$  la especie de reacción.

**Fronteras de Simetría.** Las fronteras II, III, IV, V, VII, VIII, IX, X y XI son fronteras de simetría tanto para la transferencia de calor como de masa.

$$n \cdot q_{II} = 0 \quad (6)$$

$$n \cdot \nabla C_i = 0 \quad (7)$$

**Frontera de Permeación (Membranas).** Las fronteras MI, MII, MIII, MIV, MV, MVI corresponden a la transferencia de masa a través de la membrana y se considera que no existe transferencia de calor.

$$n \cdot q_{III} = 0 \quad (8)$$

$$n \cdot q_{III} = \frac{P_i}{\delta} (P_i - P_G) \quad (9)$$

**Frontera en la chaqueta de Enfriamiento.** La frontera VI se considera la transferencia de calor a través de la chaqueta de enfriamiento del reactor.

$$n \cdot q_{VII} = hc \cdot (T_l - T) \quad (10)$$

$$n \cdot \nabla C_i = 0 \quad (11)$$

**Ecuaciones auxiliares.** Una de las suposiciones del modelo es considerar que la velocidad superficial varía con el flujo molar y temperatura; para tal efecto se emplea la siguiente ecuación:

$$u_s = T_{avg} \cdot F_T \cdot \left( \frac{R_g}{S \cdot P_T} \right) \quad (12)$$

Donde:  $S$  es el área transversal del reactor;  $T_{avg}$  la temperatura promedio de cada sección transversal y  $F_T$  es el flujo total de las especies que participan en la reacción.

La evaluación de los flujos molares para el oxígeno (A) y del etileno (B), tomados como variables independientes, se evalúan de la siguiente manera:

$$F_A = \int_{AT} N_A dA \quad (13)$$

$$F_B = \int_{AT} N_B dA \quad (14)$$

Para los flujos molares de las especies óxido de etileno (C), Agua (D) y Bióxido de Carbono (E) y el flujo total se obtiene por estequiometria (Ramírez, 2006; Tiscareño, 2007):

$$F_C = \frac{6}{5} [(F_{B_O} - F_{A_O}) - (F_B - \frac{1}{3}F_A)] \quad (15)$$

$$F_D = \frac{2}{5} [(F_B - 2F_A) - (F_{B_O} - 2F_{A_O})] \quad (16)$$

$$F_E = \frac{2}{5} [(F_B - 2F_A) - (F_{B_O} - 2F_{A_O})] \quad (17)$$

$$F_T = F_{T_O} - \frac{3}{5} [(F_{B_O} - \frac{1}{3}F_{A_O}) - (F_B - \frac{1}{3}F_A)] \quad (18)$$

## 2. Caso de estudio

Para el desarrollo de esta investigación se tomó como caso de estudio a la producción del óxido de etileno, con la intención de mostrar la factibilidad de emplear nuevas alternativas de diseño de reactores. La producción de este intermedio, por métodos convencionales, implica gastar grandes cantidades de energía para el control de la reacción, pues al ser una reacción extremadamente exotérmica presenta grandes riesgos de explosión, además de obtener bajos rendimientos debido a que las reacciones secundarias que castigan la selectividad de los productos al propiciar la formación de subproductos indeseables y sin valor agregado, en este caso, dióxido de carbono y agua.

La reacción de epoxidación del etileno emplea un catalizador de plata, el cual es fuertemente selectivo a la formación del óxido de etileno. Varios investigadores han estudiado y reportado la cinética de reacción (Twigg,

1946; Westertep y Ptasiniski, 1984) donde proponen una serie de reacciones consecutivas y en paralelo para la formación del óxido de etileno y la formación de los productos indeseables. Para el desarrollo del presente trabajo se utilizó la cinética de la oxidación parcial del etileno propuesta por Westertep (1984b) y Lordanidis (2002), los cuales sólo toman en cuenta las dos primeras etapas del sistema de reacción:



Considerando que ambas reacciones corresponden a una cinética de primer orden para el oxígeno y de orden cero para el etileno:

$$R_{eo} = k_1 C_{O_2} \quad (21)$$

$$R_{ox} = k_2 C_{O_2} \quad (22)$$

Donde:

$$k_1 = 70.4 \exp\left(\frac{-7200}{T}\right) \quad (23)$$

$$k_2 = 49.4 \times 10^3 \exp\left(\frac{-10800}{T}\right) \quad (24)$$

## 2.1. Implementación del software Comsol®

Para la simulación del reactor con membrana e intercambio de calor se utilizó el software comercial Comsol®, el cual tiene las características adecuadas para el desarrollo exitoso de este proyecto. Esta herramienta computacional es útil para modelar y resolver problemas científicos e ingenieriles basados en ecuaciones diferenciales parciales. Este software contempla la solución de acoplamiento de varios fenómenos físicos simultáneamente, como el transporte de masa, cantidad de movimiento y de energía.

La construcción de estos modelos requiere definir las propiedades fisicoquímicas de materiales que intervienen en el proceso: los valores de los parámetros de transporte y su dependencia espacial, los flujos molares de los componentes que intervienen en el proceso y las ecuaciones de transporte involucrados en el sistema. Para la solución numérica, se reali-

za por medio de la interface gráfica y apoyándose en la programación en lenguaje de Comsol®, compatible para los lenguajes en Matlab y Fortran. El software comercial Comsol® emplea el método de Elementos Finitos junto con un malleo adaptativo y con control del error usando una variedad de solucionadores numéricos.

Para formular el modelo del reactor con membrana e intercambio de calor se emplean los módulos de ingeniería química y de ecuaciones diferenciales parciales. Del módulo de ingeniería química se tomará en cuenta lo referente a la transferencia de masa y de transferencia de calor tridimensional, mientras que en el módulo de ecuaciones diferenciales parciales se establecerá un sistema unidimensional en estado transitorio.

### 3. Resultados

Debido a la naturaleza discreta del número de tubos de membrana y de intercambio, y el gran número de alternativas para su colocación interna, la optimización de la configuración interna es una tarea muy compleja; sin embargo, en el presente trabajo se han explorado directamente algunas configuraciones que en su acomodo pueden evitar perfiles pronunciados transversales y concentración. Intuitivamente se decidió explorar diferentes acomodos esperando perfiles favorables, para la distribución de tubos de enfriamiento y de membranas dentro del reactor. Además se adecuaron los diámetros de los tubos y se indagaron los flujos de etileno y oxígeno más adecuados, con la finalidad de obtener mejores conversiones y rendimientos y evitar en lo posible la formación de puntos calientes en el interior del reactor para este tipo de reacciones altamente exotérmicas.

Los diámetros de tubos de enfriamiento y de membranas utilizados para las configuraciones del reactor en las simulaciones se especifican en la tabla 1.

Tabla 1. Diámetros de membrana y tubo de enfriamiento

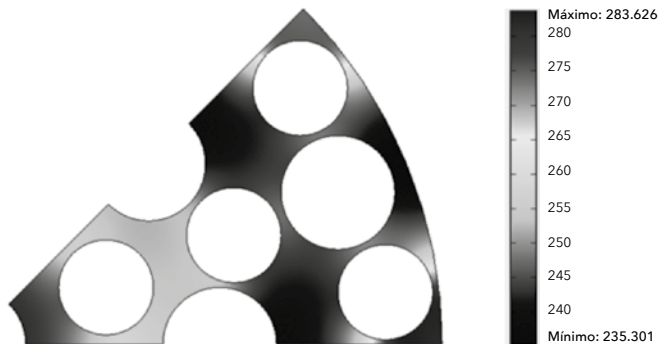
	Cantidad de tubos		
Diámetros	49	97	137
Membranas	10 mm	6 mm	4 mm
Tubos de enfriamiento	12 mm	9 mm	7 mm

En las figuras 3, 4 y 5 se muestran los perfiles de temperatura en la sección transversal a la salida del reactor, para diferentes distribuciones y número

de tubos, de las tres mejores simulaciones con la variación de tubos de 49, 97 y 137 tubos respectivamente.

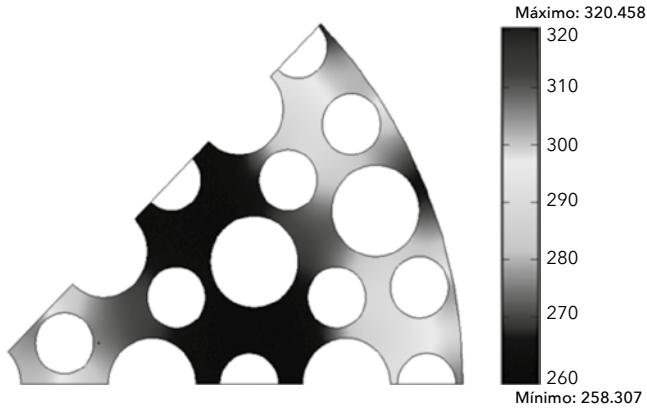
La figura 3 representa la unidad de simetría para un reactor con 49 tubos internos en total, 32 tubos son de membrana y 17 de enfriamiento. La distribución de temperatura es uniforme, presentando temperaturas máxima (283 °C) en la parte central de la sección y el centro del reactor; consecuencia de la relación Área/Volumen del reactor, y la temperatura mínima (235 °C) en la pared de la chaqueta. La conversión alcanzada fue de 51%, rendimiento del 62% y una selectividad de 61.1%.

Figura 3. Corrida de 49 tubos con una conversión de 51 por ciento, rendimiento de 62% y selectividad 61.6%



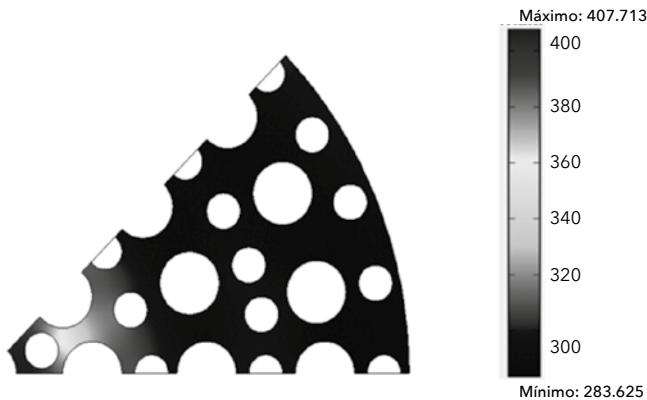
La figura 4 muestra la distribución de temperaturas para el reactor con 97 tubos (64 de membrana y 33 de enfriamiento). A diferencia de la configuración de 32 tubos, la temperatura máxima se incrementó a 320 °C y la mínima en 258 °C. Sin embargo, la conversión mejora en tres puntos porcentuales. La conversión alcanzada fue de 54%; rendimiento del 51% y una selectividad del 60.6%.

Figura 4. Corrida de 97 tubos con una conversión de 54 por ciento, rendimiento de 51%, selectividad de 60.6%, rango de temperaturas de 258 a 320 °C



En la figura 5 se muestra la distribución de temperaturas en un reactor que consta de 137 tubos (88 de membrana y 49 de enfriamiento). Para esta configuración, se observa que existe un incremento muy drástico, 407 °C, y la conversión y rendimiento disminuye considerablemente, por lo que no es recomendable considerar el diseño con esta configuración con las dimensiones establecidas. La conversión alcanzada fue de 24%, rendimiento del 29% y una selectividad de 61.7%.

Figura 5. Corrida de 137 tubos con 24% de conversión, rendimiento de 29%, selectividad de 61.7%, rango de temperaturas de 283 a 407 °C

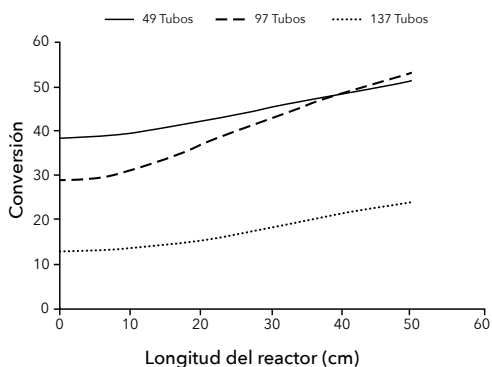




En las figuras 6, 7 y 8 se muestran las gráficas de comparación de los porcentajes de conversión, rendimiento y selectividad de las tres distribuciones mostradas en esta investigación, donde se puede apreciar que la mejor de ellas corresponde a un reactor constituido con 97 tubos, logrando una mejor conversión y rendimiento respecto a las otras configuraciones. Por otro lado se logra un mejor control de temperatura a través del reactor.

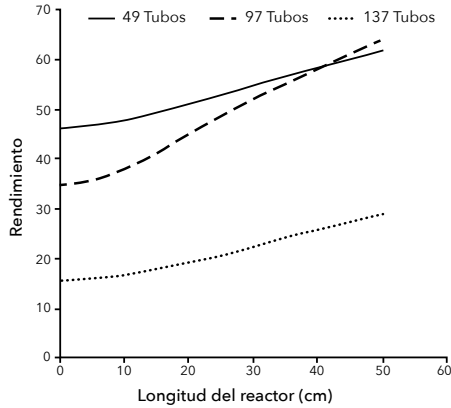
La figura 6 muestra el comparativo de la conversión alcanzada en la simulación para las distintas configuraciones, como se puede apreciar la que mayor conversión presenta es la de 97 tubos con un 54%, seguida de la 49 tubos con un 51% y por último la de 137 tubos con 24%.

**Figura 6. Gráfica comparativa de la conversión en las tres distribuciones**



La figura 6 muestra que el mejor rendimiento alcanzado en las simulaciones corresponde al reactor con 49 tubos, sin embargo, cuando la longitud del reactor alcanza los 50 cm, se logra obtener el mismo rendimiento. Es notorio que en el reactor con mayor número de tubos internos no se tienen resultados positivos.

**Figura 7. Comparación del rendimiento para tres configuraciones del reactor**



En la figura 7 se muestra el comparativo de la selectividad alcanzada en la simulación para las distintas configuraciones; además se aprecia la selectividad mejora cuando la temperatura es mayor, es decir, cuando el número de tubos se incrementa hasta 137 en la configuración del reactor.

**Figura 8. Comparación de la selectividad para tres configuraciones distintas**

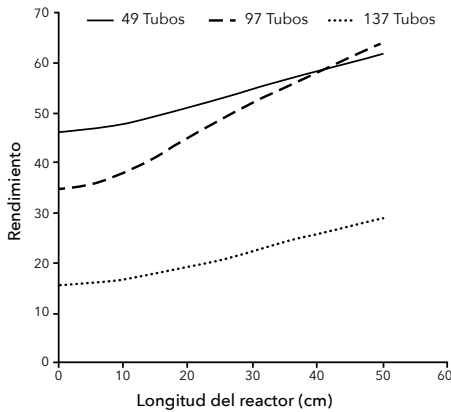


Tabla 2. Resultados de la simulación de conversión, rendimientos y selectividades a diferentes condiciones de operación

Corrida	Número de tubos	Condiciones		Temperatura °C		% Conversión	% Rendimiento	% Selectividad
		Flujo de oxígeno	Flujo de etileno	Mínima	Máxima			
1	49	0.002896	4.212	235	283	51	62	60.6
7	97	0.02606	1.6453	258	320	54	64	61.5
16	137	0.01158	2.6683	283	407	24	29	61.7

La tabla 2 muestra los mejores resultados de las simulaciones realizadas con distintas distribuciones y configuraciones de tubos en el reactor, considerando que el diámetro del reactor (10 cm), su longitud (50 cm) y la permeabilidad de la membrana ( $6.08 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s Pa}$ ) se mantienen constantes.

#### 4. Conclusiones

De la investigación realizada se pueden resaltar las siguientes conclusiones:

Debido a que la optimización de la configuración interna es una tarea muy compleja, de acuerdo con la naturaleza discreta del número de tubos y el gran número de alternativas para su colocación, se concluye que una de las mejores alternativas corresponde a la configuración de 97 tubos, en la cual se obtuvieron los mejores rendimientos y conversiones, a pesar de sacrificar la selectividad.

De acuerdo con las diferentes configuraciones y distribución de los tubos internos en el reactor, es posible lograr un buen control de temperatura en el interior del mismo, logrando perfiles uniformes, tanto en las direcciones axiales como radiales.

Para obtener las mejores condiciones de operación, se analizaron algunas de las variables continuas como los flujos molares de los reactivos, observándose que cuando se mantiene constante uno de los flujos (etileno), las

conversiones y rendimientos disminuyen, además la temperatura se incrementa significativamente. En el caso inverso, cuando el flujo de etileno varía, se observa un incremento en la conversión y en el rendimiento; además de lograr un mejor control de la temperatura.

Para lograr la optimización de reactores de esta naturaleza se requiere considerar: a) optimización de variables de flujos, concentraciones y temperaturas de alimentación así como los flujos y temperaturas de las corrientes de enfriamiento; b) estimación de la variación con la temperatura en los parámetros de transporte; c) considerar caídas de presión, y d) análisis de la variación de diámetros de tubos de enfriamiento y membranas en términos de las dimensiones del reactor.

## 5. Referencias

- Al-Juaied, M.A., D. Lafarga y A. Varma (2001). Ethylene Epoxidation in A Catalytic Packed-Bed Membrane Reactor: Experiments and Model. *Chemical Engineering Science*. 56(2): 395-402.
- Backer, R. (2004). *Membrane Technology and Applications*. 2da ed. Estados Unidos: John Wiley & Sons. 38-45.
- Basile, A., L. Paturzo y F. Laganà (2001). The Partial Oxidation of Methane to Syngas in a Palladium Membrane Reactor: Simulation and Experimental Studies. *Catalysis Today*. 67 (1-3): 65-75.
- Basile, A., L. Paturzo y A. Vazzana (2003). Membrane Reactor for the Production of Hydrogen and Higher Hydrocarbons From Methane over Ru/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalyst. *Chemical Engineering Journal*. 93(1): 31-39.
- Bird, R., W. Stewart y E. Lightfoot (2006). *Fenómenos de Transporte*. 2da ed. Limusa Wiley. Cap.13. pp. 1-29.
- Charudatta, S. P., S. A. Martin Van y J. A. M. Kuipers (2007). Fluidised Bed Membrane Reactor for Ultrapure Hydrogen Production via Methane Steam Reforming: Experimental Demonstration and Model Validation. *Chemical Engineering Science*. 62(11): 2989-3007.
- Dittmeyer, R., V. Höllein y K. Daub (2001). Membrane Reactors for Hydrogenation and Dehydrogenation Processes Based on Supported Palladium. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*. 173(1-2): 135-184.

- Dixon, A.G. (2003). Recent Research in Catalytic Inorganic Membrane Reactors. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*. 1(1): R6.
- Fernandes, F. A. N. y A. Soares (2006). Methane Steam Reforming Modeling in A Palladium Membrane Reactor. *Fuel*. 85(4): 569-573.
- Foust, A. y L. Wenzel (1989). *Principios de Operaciones Unitarias*. USA: CECSA, pp. 333-345.
- Hsieh, H. (1996). *Inorganic Membranes for Separation and Reaction*. El Sevier Science, pp. 119-127.
- O'Neill, C. y E. Wolf (2006). Yield Improvements in Membrane Reactors for Partial Oxidation Reactions. *Industrial Engineering Chemistry Research*. 45(8): 2697-2706.
- Ramírez, A, F. Tiscareño y J. Ochoa (2007). Modelamiento tridimensional para reactores catalíticos con membranas e intercambio de calor para oxidación parcial de etileno. *Memorias del XXVII encuentro Nacional AMIDIQ*. Manzanillo, Colima.
- Ramírez, A., F. Tiscareño y J. Ochoa (2006). Modelamiento tridimensional para reactores catalíticos con membranas e intercambio de calor para oxidación parcial del etileno. *Memorias del XXVIII Encuentro Nacional AMIDIQ*, Manzanillo, Colima.
- Ramírez Serrano, A., F. Tiscareño Lechuga y J. A. Ochoa Tapia (2009). *Three-Dimensional Model of a Membrane Reactor Configuration with Cooling Tubes*. *Industrial Engineering Chemistry Research*. 48(3): 1134-1139.
- Samil, A.F. y L.I. David (2001). A Review on the Latest Development of Carbon Membranes for Gas Separation. *Journal Membranes Science*. 193(1): 1-18.
- Saraco, G. et al. (1999). *High-Temperature Membrane Reactors: potential and problems*. *Chemical Engineering Science*. 54(13-14): 1997-2017.
- Saucedo Cervantes, J. A. (1999). Análisis de Factibilidad Económica de Reactores con Membranas en Procesos de Deshidrogenación. Tesis de Maestría, Instituto Tecnológico de Celaya, México.

- Seidel Morgenstern, A. (2005). *Analysis and experimental investigation of catalytic membrane reactors. Integrated Chemical Processes: Synthesis, Operation, Analysis, and Control*. K. Sundmacher, A. Kienie y A. Seidel Morgenstern, Weinheim: Wiley-VCH, pp. 359-390
- Valiente A. y J. Noriega (1993). *Manual del ingeniero químico*. México: Limusa, pp. 521-533.
- Zaman, J. y A. Chakma (1994). *Inorganic Membrane Reactors. Journal Membranes Science*. 92(1): 1-28.
- Zaspalis, V.T. y A. J. Burggraaf (1991). *Inorganic Membranes: Synthesis, Characteristics and Applications* Ed. R.R. Bhave, New York: Reinhold, pp. 249.