

Capítulo 5

CINÉTICA DE LA DHOX DE N-BUTANO

5. CINÉTICA DE LA DHOX DE N-BUTANO.

5.1 CONSIDERACIONES PREVIAS

Aunque la cantidad de trabajos estudiando diferentes tipos de catalizadores para los procesos de oxidación selectiva de alcanos ligeros es abundante, el número de éstos que se dedican al estudio de la cinética de reacción es pequeño. En los últimos años, se han publicado algunos estudios cinéticos sobre la DHOX de n-butano o propano empleando óxidos metálicos como catalizadores, en los cuales se han considerado diferentes modelos cinéticos, Eley-Rideal, Langmuir-Hinshelwood, y en especial aquellos basados en los mecanismos Mars-van Krevelen o Redox.

En el caso del propano podemos destacar los estudios realizados sobre óxidos mixtos V-Mg-O (Creaser y Andersson, 1996; Boudeville y col., 1999; Zanthoff y col., 2000; Ramos y col., 2001), óxidos de vanadio soportado sobre alúmina (Bottino y col., 2003), titania (Grabowski Samson, 2003) o sobre sílice-titania (Comité y col., 2003). También se han publicado algunos trabajos sobre la cinética de reacción empleando óxidos de molibdeno soportados sobre alúmina (Chen y col., 2001) o molibdatos mixtos de Co y Ni (Barsan y Thyron, 2003).

En el caso de la DHOX de n-butano podemos destacar los estudios realizados empleando catalizadores del tipo V-Mg-O (Téllez y col., 1999; Lemonidou, 2001; Rubio y col., 2003), óxido de vanadio soportado sobre una hidrotalcita Mg-Al-O (Dejoz y col., 1997) o molibdato de níquel (Madeira y col., 1998a y 1998b), así como el trabajo de Madeira y Portela (2002) en el que presentan una revisión de los diferentes aspectos mecanísticos y cinéticos de la DHOX de n-butano.

Dejoz y col. (1997) concluyeron que existen dos tipos de reacciones diferentes: (1) un mecanismo redox, responsable de la formación de olefinas y diolefinas (asociados a las especies vanadio) y (2) un mecanismo por radicales libres, responsable de la combustión (asociado a los centros activos del soporte). Por otra parte, se observó que la temperatura de reacción favorece los procesos de deshidrogenación oxidativa. Este comportamiento catalítico se puede explicar si se considera que los centros activos muestran una baja velocidad de reducción a 500° C. Por tanto, un aumento de la temperatura de reacción favorecerá aún más el proceso de deshidrogenación oxidativa.

Algunos autores han empleado un modelo cinético basado en el mecanismo de Mars-van Krevelen con dos tipos de centros activos (Madeira y col., 1998a; Tellez y col., 1999; Ramos, 2001; Barsan y Thyron, 2003), mientras que otros han empleado un modelo Langmuir Hinshelwood con dos tipos de centros activos (Dejoz y col., 1997), o un modelo basado en un mecanismo Rideal-Eley (Grabowski, 2003). En otros casos, se han empleado ecuaciones exponenciales mediante las cuales poder optimizar las condiciones de reacción (Bottino y col., 2003; Comité y col., 2003). En realidad, las ecuaciones matemáticas de la mayoría de estos modelos cinéticos son similares, por lo que desde un punto de vista de cálculo, no es evidente poder conocer el mecanismo de reacción. Sin embargo se puede

obtener información respecto a algunas consideraciones claves.

Lemonidou (2001) ha estudiado la deshidrogenación oxidativa de n-butano y de butenos sobre un catalizador VMgO, encontrando que la reactividad de los hidrocarburos en presencia del catalizador disminuye siguiendo el orden: 2-buteno > 1-buteno > butano >> butadieno. Los butenos se convierten fácilmente a butadieno con selectividades aproximadas al 64%, mientras que el resto sufre procesos de isomerización o combustión.

Recientemente, Rubio y col., (2003) han estudiado la cinética de la DHOX de n-butano sobre un catalizador V-Mg-O en condiciones anaeróbicas. Estos autores concluyen que las especies oxígeno de la red del catalizador se consumen durante la reacción (cambiando el estado de oxidación del catalizador durante los experimentos catalíticos) y proponen un modelo cinético en el que se considera también el estado de oxidación del catalizador. La reducción de las especies de vanadio se ha puesto de manifiesto empleando diferentes técnicas espectroscópicas: EPR (Blasco, 1998) o Reflectancia Difusa (Argyle y col., 2004).

Zantoff y col., (2000) observaron que las propiedades catalíticas de un catalizador V-Mg-O se deben a una rápida reducción de las especies VO_4^{3-} poliméricas y una reducción lenta de la fase $\text{Mg}_3\text{V}_2\text{O}_8$.

Chen y col., (2000a) estudiaron las expresiones cinéticas de la velocidad de reacción para la deshidrogenación oxidativa de propano sobre catalizadores del tipo MoO_x , VO_x o WO_x soportados sobre ZrO_2 , encontrando que en todos los casos la DHOX ocurre por un mecanismo similar y que tanto la energía de activación para la deshidrogenación de propano, como la correspondiente a la combustión de propeno incrementa de acuerdo a la siguiente ordenación: $\text{VO}_x/\text{ZrO}_2 < \text{MoO}_x/\text{ZrO}_2 < \text{WO}_x/\text{ZrO}_2$. Por tanto, la mayor o

menor facilidad con que se reducen es un factor clave en la actividad catalítica de estos materiales.

Por otra parte, varios autores proponen que el oxígeno débilmente adsorbido en la superficie del catalizador es el responsable de la combustión (Dejoz y col., 1997; López Nieto y col., 1999; Lemonidou, 2001; Rubio y col., 2003). En este sentido, se ha observado que la etapa de reducción es mucho más lenta que la etapa inversa de oxidación, sugiriendo entonces que es la etapa clave de la deshidrogenación oxidativa de alcanos (López Nieto y col., 1999).

Chen y col., (2001b) realizaron estudios con mezclas de propano y propano deuterado, y observaron que la etapa elemental relevante desde un punto de vista cinético, implica la disociación de los enlaces C-H. Por otro lado, el empleo de mezclas $^{18}\text{O}_2/\text{C}_3\text{H}_8$ indica que en la activación de propano sólo están implicados los oxígenos de la red.

En este trabajo se ha encontrado un par de catalizadores que presentan una selectividad relativamente alta para la DHOX de n-butano. De ellos el más estudiado y el que presentaría un mejor compromiso entre actividad, selectividad y posible resistencia mecánica a la atrición es el catalizador MV4-30, con un contenido de 30% en peso de SiO_2 , y una relación atómica $\text{Mg/V} = 4$. Es por esta razón que se seleccionó este catalizador para realizar el presente estudio cinético sobre la DHOX del n-butano. Se sabe que el tipo de reactor utilizado afecta fuertemente el rendimiento (Soler y col., 1998), pero para diseñarlos y optimizarlos se requiere de un modelo cinético que describa de la mejor forma posible el comportamiento del sistema bajo diferentes condiciones de operación (Soler y col., 1999). Llegado el momento, probablemente se requiera de datos y ajustes

adicionales, para los cuales este desarrollo tiene el propósito de constituirse en la base de apoyo.

5.2. PARTE EXPERIMENTAL.

La preparación y caracterización del catalizador MV4-30 sobre el que se realizó este estudio cinético ya se ha explicado en los Capítulos 3 y 4. El equipo experimental se mencionó anteriormente, realizando las experiencias a presión atmosférica en un rango de temperaturas entre 475-550° C, variando el tiempo de contacto entre 10 y 60 $\text{g}_{\text{cat}}/(\text{mol}_{\text{C}_4\text{H}_{10}}/\text{h})$, la concentración de n-butano en la alimentación entre 2 y 8% molar y la de oxígeno entre 8 y el 20%. El catalizador, antes de montarlo en el reactor, fue aglomerado a 5000 psia, luego molido y finalmente tamizado para seleccionar un tamaño promedio de 425 μm . La carga de catalizador utilizada fue de 0.4 g, la relación de diámetro de tubo a diámetro de partícula resultó ser de 23.5 y la altura de cada lecho superó ampliamente la altura mínima de 50 partículas, lo que asegura la reproducibilidad del empacado, el desarrollo de un patrón de flujo tipo pistón y una incidencia despreciable de los efectos de pared (Van Den Bleek K. y col., 1968). Mediante ensayos en blanco y llevando la temperatura a las condiciones más severas de operación (550° C), se comprobó que el carburo de silicio, utilizado como diluyente es inerte para el sistema en reacción. También se comprobó la reproducibilidad del empaquetado armando y desarmando el reactor varias veces y comprobando que se obtenían los mismos resultados.

5.3. DESARROLLO DEL MODELO.

Si consideramos al reactor como isotérmico, pseudo-homogéneo, que opera en estado estacionario, con flujo tipo pistón (unidimensional) y dispersión axial despreciable, el balance de masa para un elemento diferencial toma la forma:

$$\frac{d(C_j \bar{v})}{dz} = \sum_{i=1}^M \alpha_{ij} r_i \rho_c \quad (5.1)$$

Multiplicando ambos miembros de la ecuación por el área transversal del reactor y reordenando se obtiene.

$$dN_j = \left(\sum_{i=1}^M \alpha_{ij} r_i \right) * dm_c \quad (5.2)$$

donde

$$N_j = C_j \bar{v} A$$

es el: flujo molar del componente “j” (moles/h) y

$$dm_c = \rho_c A dz$$

es el elemento diferencial de masa del catalizador (g_{cat}) asociado con el elemento de volumen considerado. Este sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden (una por componente), están acopladas a través de la expresión de velocidad de reacción. Para simular el comportamiento del reactor se integraron simultáneamente entre la entrada y la salida del reactor usando el algoritmo Runge Kutta Verner de séptimo orden, que se caracteriza por su rapidez y estabilidad, ésta última se comprobó mediante ejemplos especialmente preparados para el método de diferencias finitas. La optimización de los

parámetros cinéticos se llevó a cabo mediante el uso del programa M3D especialmente diseñado para optimizar funciones altamente no lineales que dependen de un número elevado de parámetros (Papa, 1968).

Para que la simulación pueda realizarse es necesario primero proponer un esquema operativo razonable de reacciones, y para cada una de ellas, expresiones de velocidad (r_i) basadas en el mecanismo propuesto por Mars y van Krevelen (1959), cuya aplicabilidad a nuestro sistema ha sido establecida con anterioridad (López Nieto y col., 1999). Se supone que inicialmente el hidrocarburo es adsorbido sobre la superficie del catalizador, donde tiene lugar la abstracción de uno o dos hidrógenos que se combinan con oxígeno de la red para formar agua y un intermediario olefínico adsorbido. En general esta es la etapa que se considera que controla la velocidad de reacción. Por otra parte, dependiendo de la naturaleza de los centros activos del catalizador y de las condiciones de operación, las olefinas se desorberán con mayor o menor velocidad.

Todo indica que las especies de oxígeno responsables de la activación del alcano son especies O^{2-} enlazadas a centros metálicos del catalizador (Blasco, T. y col., 1997a). La función del oxígeno molecular alimentado sería la de volver a oxidar los centros catiónicos, parcialmente reducidos, que intervienen en la reacción. En un estudio de la oxidación de n-butano sobre un catalizador a base de VMgO utilizando reactores diferenciales se demostró que el mecanismo de Mars-van Krevelen es el que mejor explica cualitativa y cuantitativamente el comportamiento del sistema (Téllez, C. y col., 1998) por lo que este estudio se basará también en la operatividad de dicho mecanismo.

En el análisis realizado de la DHOX de n-butano sobre una serie de catalizadores con la fase activa MV4-0 soportada sobre SiO_2 muestra que las relaciones de isómeros C_4H_8 se

mantienen aproximadamente constantes independientemente de la temperatura de reacción y del nivel de conversión de n-butano, lo que indicaría que todos ellos son productos primarios de reacción con energías de activación muy similares. Además se transforman en productos más oxidados también mediante reacciones de energía de activación similares. El agregado de SiO₂ parece afectar la relación cis-2-buteno/trans-2-buteno, lo que indicaría una cierta incidencia de la reacción de isomerización que en nuestro caso no podremos discriminar por falta de datos independientes. Además, se ha observado y discutido como el agregado de SiO₂ ocasiona una notable disminución en la actividad del catalizador respecto al catalizador sin soportar (Dejoz, 2001).

Como puede verse en la Figura 5.1, la producción de CO y CO₂ tiende a un valor finito (0.15) a medida que la conversión de n-butano tiende a cero, lo que indicaría que estos productos de reacción, son a la vez primarios y secundarios. Su producción aumenta con la concentración de oxígeno molecular en los reactantes y con el tiempo de contacto.

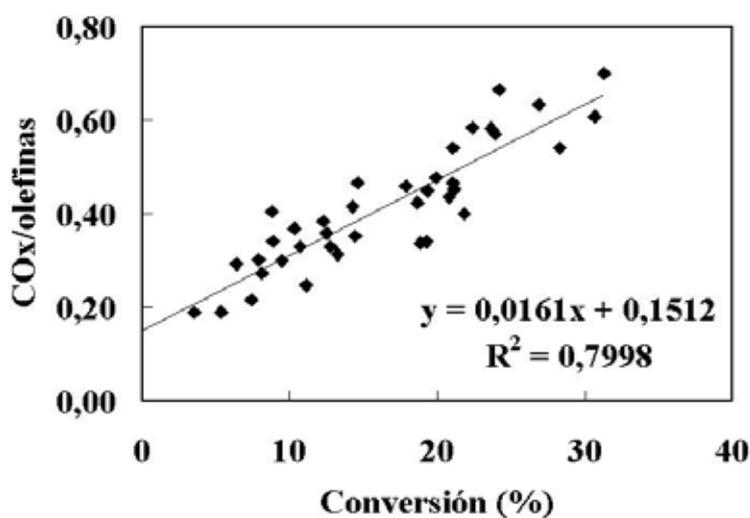


Figura 5.1. Variación de la relación CO_x/olefinas-C₄ con la conversión de n-butano

Por otro lado, se encontró que la selectividad a butadieno se incrementa con la conversión pero, como se muestra en la Figura 5.2, la relación de butadieno a mono-olefinas es todavía significativa cuando aquella tiende a cero, lo que indica que el butadieno al igual que el CO y CO₂ es al mismo tiempo un producto primario y secundario en la DHOX del butano.

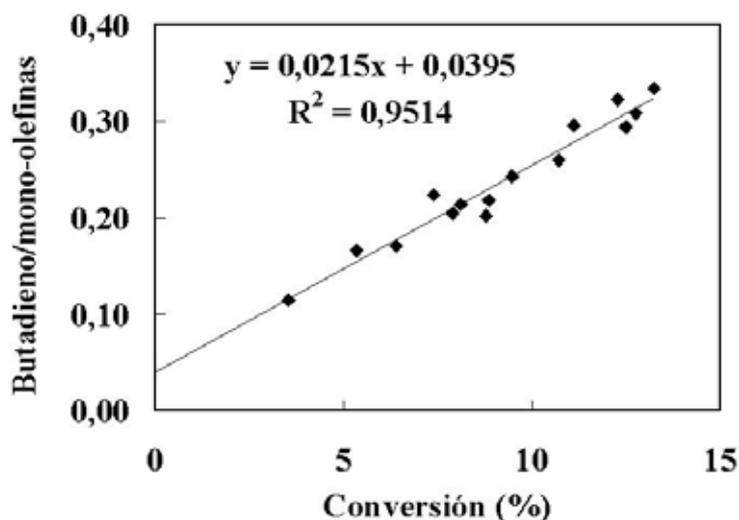


Figura 5.2. Variación de la relación butadieno/mono-olefinas con la conversión de n-butano

Cabe señalar que, a diferencia del CO y CO₂, el butadieno es un producto intermedio menos estable, lo que hace que la selectividad tienda a pasar por un máximo para conversiones de n-butano comprendidas entre el 30 y el 60% (Corma y col., 1994a; Dejoz, 2001; Téllez y col., 1998; Blasco y col., 1995).

También hay que tener en cuenta que, si bien a las temperaturas en que se realizaron las experiencias relatadas en este trabajo, se puede considerar que el estado de oxidación del catalizador está en equilibrio con la concentración de oxígeno presente, y que este equilibrio está desplazado hacia el estado oxidado, en el caso de conversiones altas donde el oxígeno está próximo a agotarse, este estado pudiera sufrir modificaciones de

consideración hacia el estado reducido, lo cual modificaría sustancialmente las selectividades (Téllez y col., 1998) y dificultaría la tarea de modelado cinético. Teniendo en cuenta las observaciones experimentales, y sobre la base de la información reseñada, se consideró plausible el esquema operativo de reacciones indicado en la Figura 5.3. Las expresiones cinéticas utilizadas se desarrollaron en base al mecanismo de Mars-van Krevelen, considerando que las reacciones tienen lugar sobre dos tipos de centros activos: uno selectivo para las reacciones de deshidrogenación oxidativa, y el otro para la oxidación total a COx .

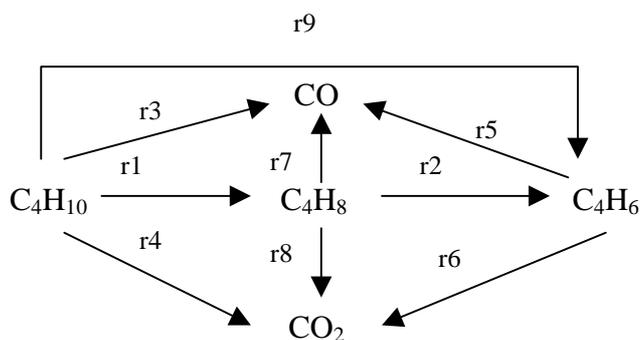
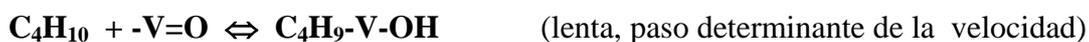
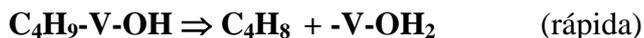


Figura 5.3. Esquema de reacción propuesto para la DHOX de n-butano

Dado que no se tiene la información necesaria para discriminar las posibles reacciones de isomerización entre los butenos, en el esquema operativo se tratarán como un solo compuesto.

Para la deducción de las expresiones de velocidad correspondientes a las reacciones de DHOX, se supone que las mismas tienen lugar preferentemente sobre centros activos que denominaremos “X” ($-V=O$) con un mecanismo como el siguiente:





Estas etapas representan la activación de los hidrocarburos por los centros activos oxidados con la consiguiente reducción del catalizador, seguida por una secuencia de etapas muy rápidas, dando los productos de reacción y uno o más centros reducidos. Debemos señalar que la reacción de oxidación del catalizador puede ser entre 6-10 veces más rápida que la etapa de reducción (López Nieto y col., 1999), por lo que la influencia de ésta en la velocidad global debería ser despreciable.

Respecto a las reacciones de oxidación total a óxidos de carbono y agua se supondrá que tienen lugar sobre centros de tipo que denominaremos “Y” mediante un mecanismo de ataques sucesivos de átomos de oxígeno hasta la producción de CO, CO₂ y agua. Si con los subíndices **t**, **o**, **r** y **w** identificamos la concentración total de centros, los oxidados, los reducidos y los que tienen agua adsorbida respectivamente, los balances para ambos tipos se pueden escribir de la forma

$$[\mathbf{X}_t] = [\mathbf{X}_o] + [\mathbf{X}_r] + [\mathbf{X}_w] \quad (5.3)$$

$$[\mathbf{Y}_t] = [\mathbf{Y}_o] + [\mathbf{Y}_r] + [\mathbf{Y}_w] \quad (5.4)$$

Aceptando que la adsorción de agua alcanza el equilibrio con una constante K_w , y que se establece un estado pseudo-estacionario entre las reacciones de oxidación y las de reducción, se debe cumplir que

$$2\mathbf{r}_{\text{ox}} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 \quad (5.5)$$

$$2r_{ox2} = 9r_3 + 13r_4 + 7r_5 + 11r_6 \quad (5.6)$$

Resolviendo estas ecuaciones se obtienen las expresiones para la concentración de los sitios activos en el estado oxidado:

$$[X^o] = \frac{[X_t] * k_{ox} * P_{O_2}}{k_{ox} * P_{O_2} + (k_1 * P_{C_4H_{10}} + k_2 * P_{C_4H_8} * (1 + K_w * P_{H_2O}))} \quad (5.7)$$

$$[Y^o] = \frac{[Y_t] * k_{ox2} * P_{O_2}}{k_{ox2} * P_{O_2} + (9 * k_3 * P_{C_4H_{10}} + 13 * k_4 * P_{C_4H_{10}} + 7 * k_5 * P_{C_4H_6} + 11 * k_6 * P_{C_4H_6}) * (1 + K_w * P_{H_2O})} \quad (5.8)$$

En la Tabla 5.1 se resumen las expresiones de velocidad usadas.

Tabla 5.1 Expresiones de velocidad de reacción para el modelo escogido.

Reacción	Expresión de Velocidad
1	$r_1 = k_1 * P_{C_4H_{10}} * X^o$
2	$r_2 = k_2 * P_{C_4H_8} * X^o$
3	$r_3 = k_3 * P_{C_4H_{10}} * Y^o$
4	$r_4 = k_4 * P_{C_4H_{10}} * Y^o$
5	$r_5 = k_5 * P_{C_4H_6} * Y^o$
6	$r_6 = k_6 * P_{C_4H_6} * Y^o$
7	$r_7 = k_7 * P_{C_4H_8} * Y^o$
8	$r_8 = k_8 * P_{C_4H_8} * Y^o$
9	$r_9 = k_9 * P_{C_4H_{10}} * X^o$
Oxidación X ^f	$r_{ox} = k_{ox} * P_{O_2} * X^f$
Oxidación Y ^f	$r_{ox2} = k_{ox2} * P_{O_2} * Y^f$

5.4. PRESENTACIÓN Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS.

El modelo descrito no fue el único considerado, pero es el que mejor representa el comportamiento del sistema manteniendo un cierto grado de simplicidad. Los valores de ajuste de los parámetros se muestran en la Tabla 5.3. En la Figura 5.4 se presentan resultados de la conversión predicha por el modelo en función de los valores experimentales donde se mantuvo constante la composición de alimentación. Teniendo en cuenta los errores experimentales propios del equipo con que contábamos, se puede decir que la predicción es buena a bajas conversiones pero se deteriora un poco a altas temperaturas y/o conversiones.

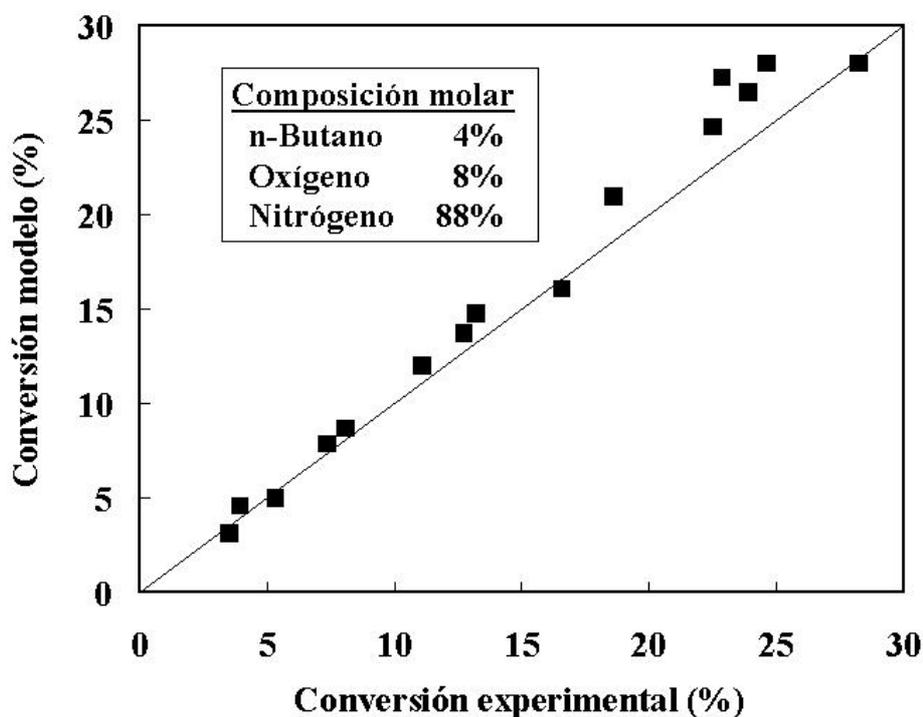


Figura 5.4. Conversión predicha por el modelo en función de la conversión de n-butano obtenida experimentalmente.

Otra muestra del comportamiento satisfactorio del modelo puede apreciarse en la Figura 5.5 donde se observan las fracciones molares de butenos y de butadieno a la salida del reactor en función de los valores predichos por el modelo.

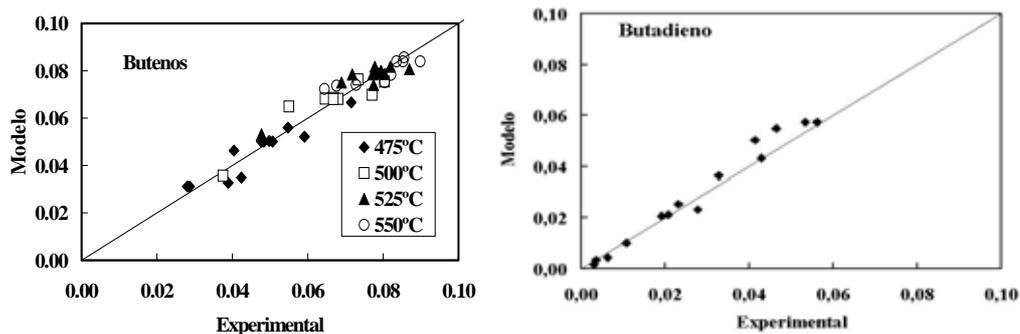


Figura 5.5. Variación de la composición molar experimental versus la predicha por el modelo 3 a la salida del reactor.

Tabla 5.2 Parámetros Cinéticos y Resultados estadísticos

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
Función Objetivo	0.6421	Kw	0.00 ± 5.11
Coef. Correlación	0.8715	K ₃₀	6.16E-02 ± 9.35E-03
Varianza	2.056E-03	Ea3	161.38 ± 198.87
K ₁₀	4.455E-02 ± 9.25-04	K ₄₀	3.43E-02 ± 8.38E-04
Ea ₁	946.16 ± 20.28	Ea4	33.44 ± 17.32
K ₂₀	0.297 ± 1.08E-02	K ₅₀	4.38 ± 0.30
Ea ₂	744.56 ± 31.23	Ea ₅	563.39 ± 51.97
K _{oxo}	18.99 ± 22.39	K ₆₀	3.64 ± 0.25
Ea _{ox}	755.64 ± 11.96	Ea ₆	614.48 ± 51.86

En la Figura 5.6 en cambio se muestran con puntos los valores experimentales de selectividad para butenos, butadieno, CO y CO₂ en función del tiempo de contacto, y mediante líneas lo valores predichos por el modelo. Como puede observarse el modelo representa en forma satisfactoria los datos experimentales.

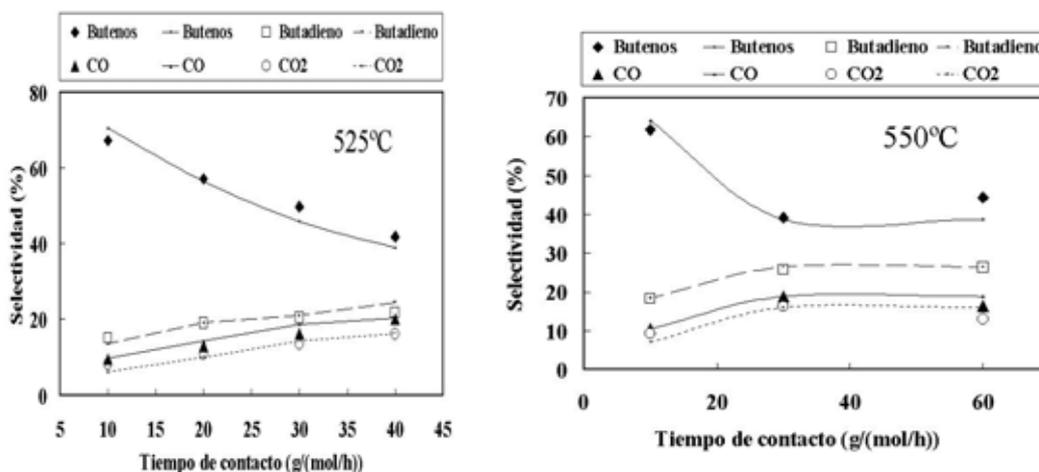


Figura 5.6.- Selectividades a los productos mayoritarios de reacción en función del tiempo de contacto para dos niveles de temperatura: 525°C y 550°C, respectivamente

La dispersión de datos se debe en parte a los errores experimentales, pero en gran medida a aquellas experiencias donde, por el elevado nivel de conversión, la concentración de oxígeno a la salida es muy próxima a cero o nula. En esta situación se produce una abrupta elevación de la selectividad a butenos y una disminución en la producción de CO y CO₂ que ha sido imposible modelar, ya que el estado de oxidación del catalizador cambia en una medida tal, que afecta considerablemente los valores de los parámetros, y tal vez también provoca un cambio en el mecanismo de reacción. Los modelos son incapaces de tener en cuenta estos efectos y ello explica el porqué de la tendencia a trabajar a conversiones entre bajas y moderadas cuando se quiere dilucidar el mecanismo de reacción.

Como una proporción considerable de los datos se ha obtenido en condiciones relativamente alejadas del agotamiento de oxígeno, ellos son los que determinan en gran medida los valores de los parámetros, y de allí que el ajuste se desmejora para condiciones de alta conversión y casi agotamiento de oxígeno.

En las Figuras 5.7 se muestran el efecto de las presiones parciales de n-butano y de oxígeno sobre la selectividad hacia los productos mayoritarios de reacción, y comparan los resultados experimentales con las predicciones del modelo.

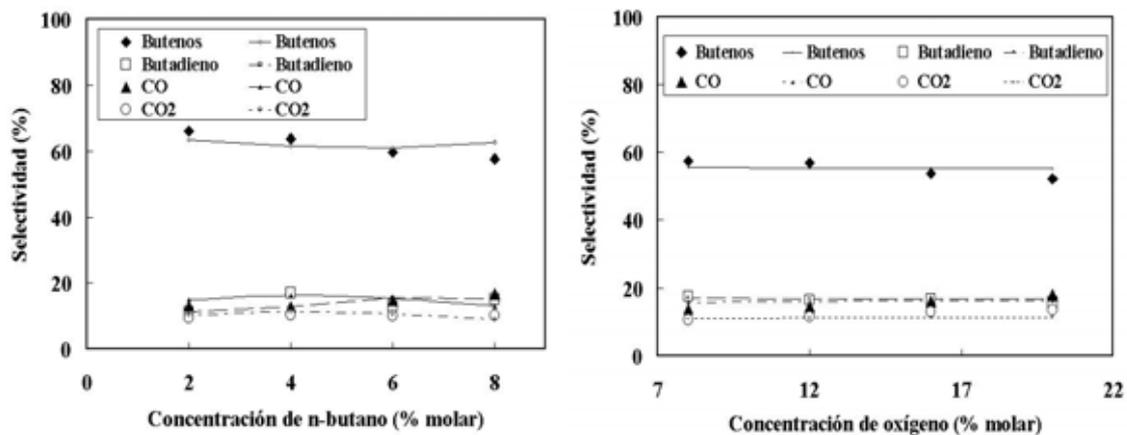


Figura 5.7.- Variación de las selectividades a los productos mayoritarios de reacción en función de A) concentración de butano, obtenidos a 475° C, una fracción molar de oxígeno de 12 % y un tiempo de contacto, W/F, de 30 g_{cat} h/(mol_{C₄H₁₀)). B) concentración de oxígeno, a 500° C, una fracción molar de butano de 4 % y un tiempo de contacto de 30 30 g_{cat} h/(mol_{C₄H₁₀))}}

Por otro lado, en la Figura 5.8 se presentan las velocidades de formación promedio [moles/(h g_{cat})]:

- De productos deshidrogenados en función de la concentración de oxígeno (A) y de n-Butano (B) observándose una dependencia despreciable con el primero y una clara dependencia con el segundo.

- De $[CO+CO_2]$ en función del oxígeno (C) y del n-Butano (D) alimentados observándose que depende de la concentración alimentada del primero mientras que varía en mucha menor medida con la concentración del segundo.

Este comportamiento confirmaría el modelo redox adoptado para éste sistema. La predicción de la conversión y selectividades hacia los productos de la deshidrogenación oxidativa de n-butano con el catalizador V-Mg-O soportado en SiO_2 es, en general, satisfactoria. Las energías de activación de las reacciones de deshidrogenación son mayores que las energías de activación de las reacciones de oxidación total, lo que concuerda con los resultados de Dejoz y col., (1997). El modelo, sin embargo, no predice un efecto inhibitor significativo del agua adsorbida, lo cual se debe a que su concentración a la salida es todavía muy baja para que el fenómeno se haga significativo.

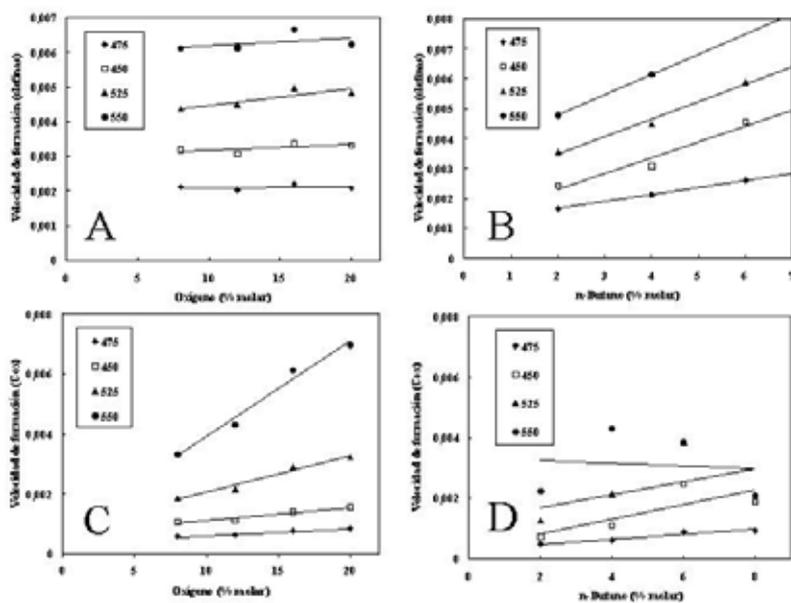


Figura 5.8.- Velocidades de formación [moles/(h g_{cat})] de los productos mayoritarios de reacción en función de la concentración de oxígeno (A) y de la concentración de n-Butano (B) y de CO más CO₂ (COx) en función de la concentración de oxígeno (C) y de la concentración de n-Butano (D).

El modelo es simple y es capaz de simular con una fidelidad aceptable el comportamiento del sistema analizado. Se intentó el modelado utilizando mecanismos diferentes al citado, pero con resultados deficientes que no se reportan. Se podría mejorar el modelo escogido ampliando el rango de experimentación y su precisión pero ello estaba fuera de nuestras posibilidades. En general se observa un buen ajuste de los datos a bajas conversiones, pero no tan excelente a altas conversiones, lo cual se atribuye más a un cambio en el estado de oxidación del catalizador que a deficiencias propias del modelo. Se demuestra que a los fines de diseño los modelos simples son capaces de simular el comportamiento del sistema y se deja un programa trabajando para evaluar el comportamiento de futuros catalizadores.

5.5 SIMBOLOS Y UNIDADES UTILIZADAS.

α_{ij}	Coefficiente estequiométrico para el reactante j en la reacción i
ρ_c	Densidad aparente del catalizador (g/m^3)
A	Área transversal del reactor (m^2)
C_j	Concentración del j-ésimo componente (mol/m^3)
E_{a_i}	Energía aparente de activación para la reacción i (J/mol)
g_{cat}	Gramos de catalizador (g)
K_i	Factores preexponenciales para la reacción i ($\text{mol}/\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{h}$)
k_i	Constante específica de velocidad para la reacción i ($\text{mol}/\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{h}$)
k_{ox}	Constante de oxidación ($\text{mol}/\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{h}$)
K_w	Constante de equilibrio para la adsorción del agua ($\text{mol}/\text{g} \cdot \text{h}$)
[X]	Concentración de sitios activos selectivos (mol/m^3)
N_j	Flujo molar de componente j (mol/h)
P_{HC}	Presión parcial del hidrocarburo (atm)
P_{O₂}	Presión parcial del oxígeno (atm)
P_p	Presión Parcial (atm)
[Y]	Concentración de sitios activos no selectivos (mol/m^3)
r_i	Velocidad de reacción para la reacción i ($\text{moles}/\text{h} \cdot \text{g}$)
T	Temperatura de reacción (K)
\bar{v}	Velocidad de flujo lineal en dirección z (m/h)
W/F	Tiempo de contacto ($\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{h} (\text{mol}_{\text{C}_4\text{H}_{10}})^{-1}$)

