



ELABORACIÓN DE PROTOCOLO EXPERIMENTAL PARA EL ESTUDIO DE LA CATÁLISIS HOMOGÉNEA EN LA ESTERIFICACIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO CON ETANOL Y LA SEPARACIÓN DE SUS PRODUCTOS

Razo Morelos A.¹, Pimentel Alarcón M.¹, Manríquez Tolsá Ú.¹

¹Facultad de Química UNAM, Coyoacán Circuito Exterior, Ciudad de México, México



RESUMEN

Este proyecto busca elaborar una metodología experimental que permita el estudio de la cinética de reacción catalítica homogénea correspondiente a la producción de acetato de etilo y su posterior purificación.

Se utilizan conceptos de cinética química, balances de materia y como método de cuantificación se emplea la cromatografía de gases.

INTRODUCCIÓN

La esterificación de ácido acético con etanol produce acetato de etilo y agua, y es catalizada en medio ácido:

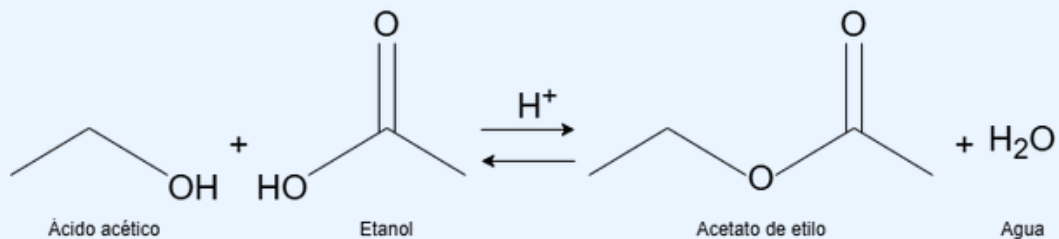


Figura 1. Esquema de la reacción de esterificación.

El acetato de etilo puede ser separado del resto de componentes de reacción mediante extracción líquido-líquido, utilizando agua como líquido de remoción, ya que el acetato de etilo es el único componente inmiscible en esta.

METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

1 Se diseñó el montaje de un reactor batch de tres bocas enchaquetado, con termómetro interno, baño de temperatura, motor que controla la agitación y condensador (Figura 2).

2 Se realizaron un total de 20 experimentos variando la cantidad de catalizador con respecto al volumen de reactivos (0.1%, 0.4%, 0.7% y 1%) a temperaturas de 40°C, 50°C, 60°C, 70°C y 71°C.

3 Se tomaron muestras cada 5 min durante una hora para posteriormente analizarlas por cromatografía de gases.

4 Se realizó la extracción líquido-líquido en un promedio de 3 etapas hasta llegar a una composición superior al 95% en masa de acetato de etilo en la fase orgánica (Figura 3).

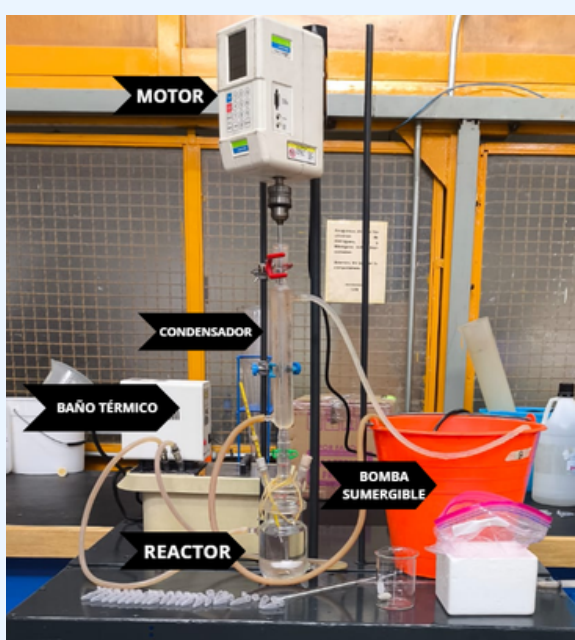


Figura 2. Montaje experimental.

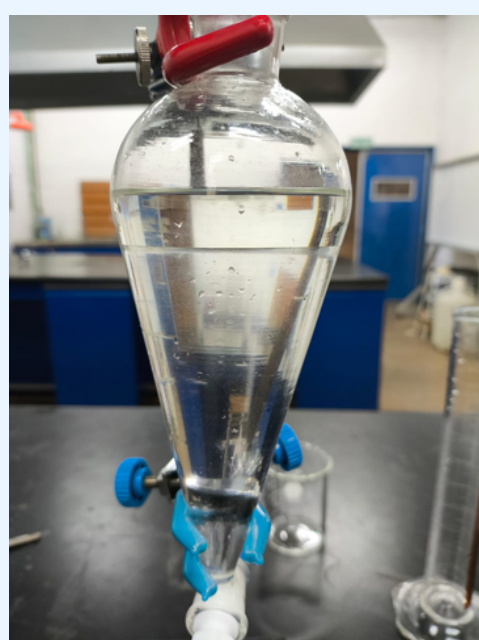


Figura 3. Separación en dos fases.

¹Fogler, H. S. (2005). Elements of chemical reaction engineering. Pearson Education.

²Chamba Escobar, E. N., Armijos Correa, J. G., León Cueva, W. P., Zhigüe Armijos, L. E., y Agreda Valle, E. D. (2024). Extracción líquido-líquido: principios fundamentales y su aplicación en tratamiento de aguas residuales. revisión bibliográfica. Conocimiento Global, 9(2):388-395. Artículo de revisión.

RESULTADOS

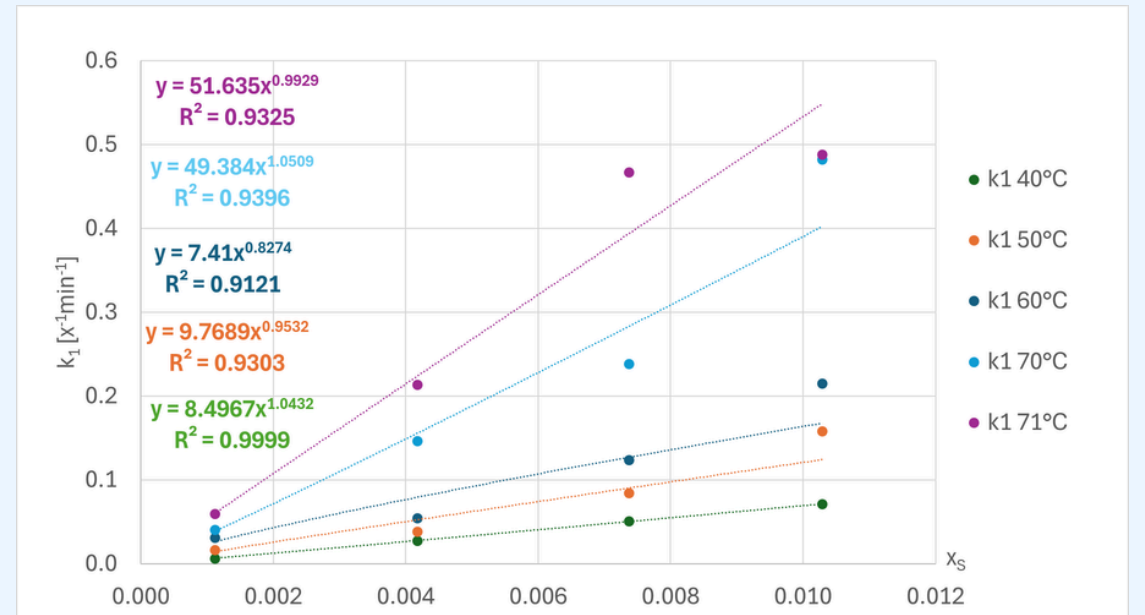


Figura 4. Constante cinética en función de la temperatura a diferentes concentraciones de catalizador

Tabla 1. Parámetros de Arrhenius para cada concentración de catalizador.

% f_c	x_s	E_a [kJ/mol]	A [$x^{-1} \text{min}^{-1}$]
1	0.0103	50.0584	1.9336×10^7
0.7	0.0074	51.4301	1.9336×10^7
0.4	0.0042	53.0297	1.9336×10^7
0.1	0.0011	56.0778	1.9336×10^7

Se realizaron ajustes de los resultados con la ecuación de Arrhenius, probando dos modelos; uno donde el catalizador está integrado a la ecuación cinética y otro donde se encuentra dentro de la energía de activación de la constante cinética.

El modelo de mejor ajuste fue el que se muestra a continuación:

$$k_1 = Ae^{\frac{E_a'}{RT}}$$

$$E_a' = -640.62 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} * x} C_s + 56.323 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

Tabla 2. Resultados de las extracciones líquido-líquido..

T [°C]	x_s	Efectividad de separación			Acetato de etilo		
		%ES	f_w	N. Etapas	V [mL]	%m/m	V_i [mL]
40	0.0103	26.5	2	3	2.3	98.7	91.4
	0.0074	No hubo separación			220	37.0	85.1
	0.0042	No hubo separación			220	30.0	68.5
	0.0011	No hubo separación			220	18.2	41.1
50	0.0103	52.8	1.5	2	18	94.2	54.7*
	0.0074	58.5	1.5	3	16	97.9	104.2
	0.0042	No hubo separación			222	55.0	85.6
	0.0011	No hubo separación			228	33.8	61.3
60	0.0103	86.9	1	3	46	96.1	108.5
	0.0074	78.7	1.5	3	32	98.0	105.8
	0.0042	42.2	1.5	2	10	94.6	102.9
	0.0011	No hubo separación			220	29.9	44.9
70	0.0103	83.8	1.5	3	36	98.2	98.6
	0.0074	78.3	1.5	3	34	98.4	109.1
	0.0042	73.3	1.5	3	30	98.1	103.8
	0.0011	No hubo separación			220	37.0	92.1

CONCLUSIONES

- La metodología permite estudiar la cinética de la reacción, donde se puede apreciar que la rapidez de reacción aumenta de forma exponencial con la temperatura, mientras que la masa de catalizador es proporcional a la energía de activación de la reacción.
- Siempre y cuando la proporción de acetato de etilo sea mayor que la de ácido acético y etanol en la mezcla de reacción, es posible separar este producto mediante extracción líquido-líquido, con una pureza de hasta 98.7%.
- A partir de los resultados presentados se desarrolló un protocolo experimental para un grupo de 12 alumnos donde 4 equipos, uno por cada concentración de catalizador, realizan experimentos de 3 temperaturas, durante al menos 40 min, con la finalidad de obtener los parámetros mostrados en la Tabla 1.

