



Artículo original / Original article

Simulación de la descomposición del Peróxido de Hidrógeno en un Reactor Continuo de Mezcla Perfecta

Simulation of the decomposition of Hydrogen Peroxide in a Continuous Perfect Mixing Reactor

Ali Epifanio Díaz-Cama ^{1*}; Marleni Vilma Bautista-Espinosa ¹;
Lucio Jara-Bautista ¹; Jorge Pedro Paucar-Luna ²; Jesus Manuel Flores-Arizaca ³

¹Universidad Nacional Federico Villareal, Lima, Perú

²Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú

³Universidad Nacional Amazónica de Madre de Dios, Puerto Maldonado, Perú

Recibido: 15/08/2023

Aceptado: 21/10/2023

Publicado: 30/01/2024

*Autor de correspondencia: adiaz@unfv.edu.pe

Resumen: Se modeló y simuló el estudio cinético de la descomposición del Peróxido de Hidrógeno en un reactor Batch tipo CSTR (Reactor Continuo de Mezcla Perfecta). Durante el estudio se determinaron las presiones parciales del Oxígeno y a partir de estos datos se realizaron las simulaciones en el reactor Batch tipo CSTR para temperaturas de 15, 25 y 30 °C, de los que se desarrollaron las respectivas gráficas señaladas en las figuras 2, 3 y 4. Mediante el método diferencial se determinaron las constantes de velocidad de la descomposición del peróxido para las determinadas temperaturas, siendo 0,08264916; 0,277130 y 0,343501 min⁻¹ respectivamente, donde el orden de reacción encontrado en cada caso fue de uno. En base a esos resultados se encontró que la Energía de Activación para la descomposición del peróxido de Hidrógeno utilizando Dicromato de Potasio como catalizador, fue de 86,36 kJ/mol. Durante la simulación para un reactor Batch isobárico a volumen constante y variable, se determinaron las ecuaciones de diseño, las curvas de reacción y tiempos de reacción para determinadas conversiones.

Palabras clave: constante de velocidad; descomposición del peróxido de hidrogeno; energía de activación; velocidad de reacción

Abstract: The kinetic study of the decomposition of Hydrogen Peroxide was modeled and simulated in a CSTR-type Batch reactor (Continuous Perfect Mixing Reactor). During the study, the partial pressures of Oxygen were determined, and from these data the simulations were carried out in the CSTR-type Batch reactor for temperatures of 15, 25 and 30 °C, from which the respective graphs indicated in figures 2, 3 and 4. Using the differential method, the rate constants of peroxide decomposition were determined for the certain temperatures, being 0.08264916; 0.277130 and 0.343501 min⁻¹ respectively, where the reaction order found in each case was one. Based on these results, it was found that the Activation Energy for the decomposition of Hydrogen peroxide using Potassium Dichromate as a catalyst was 86.36 kJ/mol. During the simulation for an isobaric Batch reactor at constant and variable volume, the design equations, reaction curves and reaction times for certain conversions were determined.

Keywords: rate constant; decomposition of hydrogen peroxide; activation energy; rate reaction

1. Introducción

El peróxido de hidrógeno es un compuesto químico incoloro a temperatura ambiente (Sarría et al., 2001), también conocido como agua oxigenada, cuya característica es de un líquido altamente polar (Velastegui & Toapanta Vargas, 2018), usado comúnmente como agente blanqueador y desinfectante. Su descomposición produce agua y oxígeno (Aguilar Muñoz & Durán Torres, 2011). Esta reacción es exotérmica, lo que significa que libera energía en forma de calor, su descomposición es llamada una reacción de desproporción (Pędziwiatr, 2018). La descomposición del peróxido de hidrógeno puede ser catalizada por enzimas como la catalasa que se encuentra en muchos organismos vivos. La catalasa acelera la descomposición de peróxido de hidrógeno, formado por la reacción del ion radical superóxido y la enzima superóxido dismutasa, en oxígeno y agua (Corona et al., 2015). La descomposición del peróxido de hidrógeno también puede ser influenciada por factores como la temperatura, pH y iones metálicos (De la Macorra et al., 2004). A altas temperaturas, la descomposición del peróxido de hidrógeno puede ocurrir de manera más rápida y violenta, lo que puede generar una explosión. En la descomposición del Peróxido de Hidrógeno la velocidad de esta reacción varía por acción de la temperatura, la presencia de catalizadores y la presión del sistema (Levenspiel, 1987; Soto, 2003).

El orden de reacción (Ancheyta Juarez, 2016) describe cómo la velocidad de la reacción depende de las concentraciones de los reactivos. Para la descomposición del peróxido de hidrógeno, el orden de reacción puede variar dependiendo de las condiciones específicas y del catalizador utilizado. En condiciones normales la descomposición del H_2O_2 generalmente sigue una cinética de primer orden respecto al H_2O_2 . Esto significa que la velocidad de la reacción es proporcional a la concentración del H_2O_2 (Jimenez Medina & Serna Velasquez, 2017). La presencia de un catalizador puede cambiar el mecanismo de la reacción y la orden de esta. En presencia de catalizadores, la descomposición del H_2O_2 puede seguir una cinética más compleja (Kimbrough et al., 1997).

Con relación a la constante de velocidad la constante K casi siempre depende de la temperatura, en reacciones en fase gaseosa también depende del catalizador y puede ser función de la presión total y además puede depender de otros parámetros (Fogler, 2013), su valor es grande cuando las reacciones son rápidas y pequeña cuando son lentas (Sánchez Manzanares, 2011).

Mediante el Método diferencial para una reacción reversible es posible determinar el orden de reacción α y la constante de velocidad diferenciando numéricamente los datos de concentración contra el tiempo, considerando que la reacción se efectúa isotérmicamente en un reactor Batch a volumen constante (Fogler, 2013), un método gráfico muy conveniente para determinar el orden de una reacción con el método diferencial consiste en graficar la forma logarítmica de la ecuación de velocidad (Smith, 1991). Para el caso de primer orden, la forma logarítmica está representada por la ecuación 15.

2. Materiales y métodos

2.1. Materiales y reactivos

Sensor de presión, Sensor de Temperatura, Bomba peristáltica, dos vasos de precipitado de 100 mL; Pipetas de 5, 10 y 25 mL; Agua oxigenada al 3 %, Agitador magnético, Catalizador (Dicromato de Potasio), Termómetro, Tapón de goma, Jeringa descartable, MultiLog de adquisición de datos.

2.2. Preparación de la concentración inicial

La solución del peróxido utilizado tiene una concentración del 3 %, para preparar la nueva concentración se utilizaron 2 mL de solución compuesta por: 0,5 mL de H_2O ; 0,5 mL de H_2O_2 y 1,0 mL de solución de dicromato de potasio, siendo el volumen inicial de la solución 0,5 mL H_2O_2 . El procedimiento para preparar la nueva solución es la siguiente:

$$C_1 = 3\%; V = 0,5 \text{ ml}; V_2 = 2,0 \text{ ml}; C_2 = x$$

Por la fórmula de dilución la concentración final equivale al 0,8 %, que es equivalente a 0,8 mg de H_2O_2 . Este resultado se divide entre 100 mL dando 0,0075 mg/mL. Posteriormente calculamos la concentración real dividiendo entre el peso molecular, siendo $C_2=0,00022058 \text{ mol/mL}$, este resultado multiplicado por 1000 ml/L, se convierte en $C_2= 0,220588235 \text{ mol/L}$.

2.3. Preparación de la concentración inicial

Se instaló el equipo de acuerdo con la Figura 1 para proceder con la experimentación, se puso en marcha el Multilog, en forma paralela se inyectó el catalizador, previamente se conecta con el sensor de presión, y se deposita en el interior del tubo 0,5 mL de agua oxigenada y 0,5 mL de agua destilada, conectándose la jeringa con 0,1 mL de solución de dicromato de potasio al tapón de goma. Se Introduce el magneto y se coloca todo el montaje sobre el agitador magnético que girará a pocas revoluciones.



Figura 1. Montaje para procedimiento experimental

Se pone en marcha el MultiLog de adquisición de datos y se ejecuta el software MultiLab.

3. Resultados y Discusiones

3.1. Tratamiento Cinético de Datos (determinación de las presiones Parciales del Oxígeno)

Debido a que las curvas contienen una presión inicial de arranque, donde están incluidas la presión atmosférica y la presión de inyección, estas se eliminan, quedando solamente la presión parcial del O_2 y la presión de saturación del agua. Suavizando adecuadamente las respectivas curvas se obtienen las siguientes tablas:

a) Temperatura de operación a 15 °C

Tabla 1. Datos de Presión del O_2 a 15 °C

Muestra	Tiempo (min)	Presión (kPa)	Muestra	Tiempo (min)	Presión (kPa)
1	3,50	0,9307	12	9,00	2,0033
2	4,00	1,0470	13	9,50	2,0798
3	4,50	1,1593	14	10,00	2,1530
4	5,00	1,2677	15	10,50	2,2231
5	5,50	1,3724	16	11,00	2,2901
6	6,00	1,4732	17	11,50	2,3541
7	6,50	1,5704	18	12,00	2,4151
8	7,00	1,6640	19	12,50	2,4733
9	7,50	1,7540	20	13,00	2,5286
10	8,00	1,8405	21	13,50	2,5812
11	8,50	1,9236			

b) Temperatura de operación a 25 °C

Tabla 2. Datos de Presión del O₂ a 25 °C

Muestra	Tiempo (min)	Presión (kPa)	Muestra	Tiempo (min)	Presión (kPa)
1	1,00	0,9246600	8	4,50	2,8059975
2	1,50	1,3136475	9	5,00	2,9405000
3	2,00	1,6577600	10	5,50	3,0494475
4	2,50	1,9599375	11	6,00	3,1353600
5	3,00	2,2230600	12	6,50	3,2006975
6	3,50	2,4499475	13	7,00	3,2478600
7	4,00	2,6433600	14	7,50	3,2791875

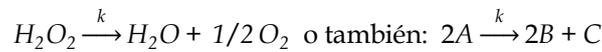
c) Temperatura de operación a 30 °C

Tabla 3. Datos de Presión del O₂ a 30 °C

Muestra	Tiempo (min)	Presión (kPa)	Muestra	Tiempo (min)	Presión (kPa)
1	0,50	0,737175	8	4,00	3,776400
2	1,00	1,404000	9	10	4,50
3	1,50	1,995525	10	11	5,00
4	2,00	2,508600	11	12	5,50
5	2,50	2,941875	12	13	6,00
6	3,00	3,295800	13	14	6,50
7	3,50	3,572625	14	15	7,00

3.2. Cinética química (Determinación del orden de reacción y coeficiente de velocidad)

El estudio cinético se realizó por el método diferencial (Fogler, 2013). La descomposición del peróxido de hidrógeno tiene lugar según la reacción:



La estequiometria es la siguiente:

Componente	A	B	C	D
S _j	-1	1	1/2	1/2

Seleccionando el estado inicial como estado de referencia y considerando que solo se carga A al reactor:

$$C_0 = C_A(0) \quad y_{A(0)} = 1 \quad y_{C(0)} = 0$$

Luego:

$$C_A(\tau) = C_0 \left[y_j(0) + \sum_m^{s_j} (s_j) Z_m(\tau) \right]$$

Simplificando se tiene:

$$C_A = C_0 [1 - Z] \tag{1}$$

$$\frac{dZ}{d\tau} = r \left(\frac{t_{cr}}{C_0} \right) \tag{2}$$

$$\text{como } \tau = \frac{t}{t_{cr}}, \text{ diferenciando esta ecuación se tiene: } d\tau = \frac{1}{t_{cr}} dt \tag{3}$$

Reemplazando (3) en (2) se tiene: $\frac{dZ}{dt} = \frac{r}{c_0}$ (4)

$$r = kC_A^\alpha \quad (5)$$

Reemplazando (1) en (5):

$$r = kC_0^\alpha (1 - Z)^\alpha \quad (6)$$

Reemplazando (6) en (4):

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{kC_0^\alpha (1-Z)^\alpha}{c_0}, \text{ operando esta ecuación se tiene:}$$

$$\frac{dZ}{dt} = kC_0^{\alpha-1} (1 - Z)^\alpha \quad (7)$$

El número de moles totales se calcula a partir de: $(N_{TOTAL})_t = (N_{TOTAL})_0 \cdot [1 + \Delta m \cdot Zm]$, reemplazando se tiene:

$$(N_{TOTAL})_t = (N_{TOTAL})_0 \cdot [1 + 1/2 Z] \quad (8)$$

Considerando que el oxígeno se comporta en forma ideal: $P \cdot V = N \cdot RT$, su expresión es equivalente a:

$$P_0 \cdot V = (N_{TOTAL})_0 \cdot RT_0 \quad (9)$$

$$P_t \cdot V = (N_{TOTAL})_t \cdot RT_1 \quad (10)$$

Dividiendo (9) entre (10)

$$\frac{P_0}{P_t} = \frac{(N_{TOTAL})_0}{(N_{TOTAL})_t} \quad (11)$$

Reemplazando (8) en (11):

$$P_t = P_0 \cdot (1 + 1/2 Z) \quad (12)$$

Despejando Z se tiene:

$$Z = 2 \cdot \left(\frac{P_t}{P_0} - 1 \right) \quad (13)$$

Diferenciando Z respecto al tiempo:

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{2}{P_0} \frac{dP_t}{dt} \quad (14)$$

Reemplazando (13) y (14) en (7):

$$\left(\frac{2}{P_0} \right) \frac{dP_t}{dt} = kC_0^{\alpha-1} \left[1 - 2 \left(\frac{P_t}{P_0} - 1 \right) \right]^\alpha, \text{ operando adecuadamente se tiene:}$$

$$\frac{dP_t}{dt} = k \cdot \left(\frac{P_0}{2} \right) \cdot C_0^{\alpha-1} \left[3 - \left(2 \cdot \frac{P_t}{P_0} \right) \right]^\alpha \quad (15)$$

Donde:

k , es la constante de velocidad; P_t , es la presión del O₂ que se está formando; P_0 , es la presión de referencia del O₂; C_0 es la concentración inicial del peróxido de hidrógeno; α es el orden de reacción.

Tomando logaritmos a esta ecuación se obtiene:

$$\ln\left(\frac{dP_t}{dt}\right) = \ln\left(k \cdot \frac{P_0}{2} \cdot C_0^{\alpha-1}\right) + \alpha \cdot \ln\left[3 - \left(2 \cdot \frac{P_t}{P_0}\right)\right] \tag{16}$$

Esta ecuación es equivalente a $Y = a + bX$, que representa una ecuación lineal con pendiente b y ordenada a .

Por lo que se deduce por comparación que:

$$Y = \ln\left(\frac{dP_t}{dt}\right) \tag{17}$$

$$a = \ln\left(k \cdot \frac{P_0}{2} \cdot C_0^{\alpha-1}\right) \tag{18}$$

$$b = \alpha \tag{19}$$

$$Y = \ln\left[3 - \left(2 \cdot \frac{P_t}{P_0}\right)\right] \tag{20}$$

Para aplicar el método diferencial se construyen las siguientes tablas con sus respectivos resultados:

Tabla 4: Determinación del orden de reacción de H₂O₂ a 15 °C mediante método diferencial

t(min)	Pt	ΔPt	Δt	Ln (ΔPt/Δt)	Pmed	ln[3-(2Pmed/P0)]
3,5	0,93066					
4,0	1,04696	0,116301	0,50	-1,458424	0,988809	8,04E-01
4,5	1,15930	0,112341	0,50	-1,493067	1,103131	7,63E-01
5,0	1,26775	0,108449	0,50	-1,528330	1,213526	7,23E-01
5,5	1,37237	0,104624	0,50	-1,564238	1,320062	6,82E-01
6,0	1,47324	0,100866	0,50	-1,600813	1,422807	6,41E-01
6,5	1,57042	0,097176	0,50	-1,638082	1,521828	5,99E-01
7,0	1,66397	0,093554	0,50	-1,676072	1,617193	5,58E-01
7,5	1,75397	0,089999	0,50	-1,714812	1,708969	5,16E-01
8,0	1,84048	0,086511	0,50	-1,754334	1,797224	4,75E-01
8,5	1,92357	0,083091	0,50	-1,794669	1,882026	4,33E-01
9,0	2,00331	0,079739	0,50	-1,835852	1,963441	3,91E-01
9,5	2,07976	0,076454	0,50	-1,877922	2,041537	3,49E-01
10,0	2,15300	0,073236	0,50	-1,920918	2,116382	3,08E-01
10,5	2,22309	0,070086	0,50	-1,964881	2,188043	2,66E-01
11,0	2,29009	0,067004	0,50	-2,009860	2,256588	2,24E-01
11,5	2,35408	0,063989	0,50	-2,055901	2,322084	1,83E-01
12,0	2,41512	0,061041	0,50	-2,103058	2,384599	1,42E-01
12,5	2,47328	0,058161	0,50	-2,151389	2,444201	1,01E-01
13,0	2,52863	0,055349	0,50	-2,200954	2,500956	6,03E-02
13,5	2,58123	0,052604	0,50	-2,251821	2,554932	2,02E-02

Según la ecuación (16), representando $\ln\left(\frac{dP_t}{dt}\right)$ en función de $\ln\left(3 - \left(2 \cdot \frac{P_{med}}{P_0}\right)\right)$ obtendremos una gráfica con recta de pendiente α .

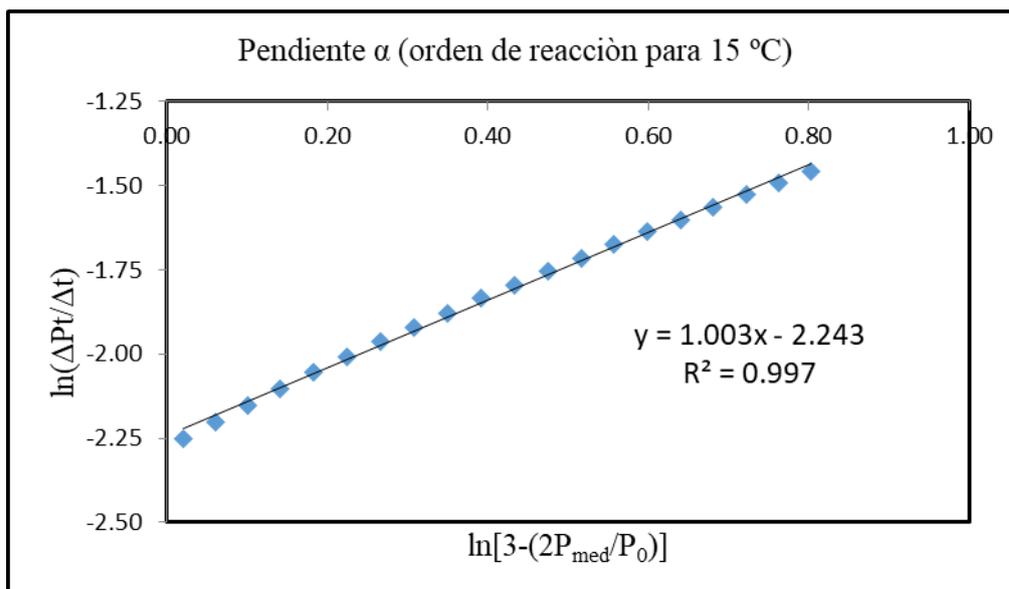


Figura 2. Recta de pendiente α a 15°C, calculados mediante método diferencial

Mediante método diferencial y regresión lineal representados en la Figura 2 se obtienen valores de: $\alpha = 1,003 \approx 1$, $a = -2,243$. Por lo tanto, el orden de reacción es 1 (uno). Reemplazando el valor de $a = -2,243$ en la ecuación (18) resulta: $-2,243 = \ln(k \cdot \frac{P_0}{2} \cdot C_0^{a-1})$, siendo: $P_0 = 2,58125$ kPa; $C_0 = 0,220588$ mol/L y $\alpha = 1,003$. Con estos datos se calcula la constante de velocidad k para 15 °C, siendo $k_{15^\circ C} = 0,08264916$ min⁻¹.

Tabla 5: Determinación del orden de reacción de H₂O₂ a 25 °C mediante método diferencial

t(min)	Pt	ΔPt	Δt	Ln (ΔPt/Δt)	Pmed	ln[3-(2P _{med} /P ₀)]
1,0	0,92466					
1,5	1,31365	0,388988	0,50	-0,251061	1,119154	7,67E-01
2,0	1,65776	0,344113	0,50	-0,373639	1,485704	6,29E-01
2,5	1,95994	0,302178	0,50	-0,503594	1,808849	4,89E-01
3,0	2,22306	0,263123	0,50	-0,641988	2,091499	3,49E-01
3,5	2,44995	0,226888	0,50	-0,790154	2,336504	2,09E-01
4,0	2,64336	0,193413	0,50	-0,949783	2,546654	7,06E-02

En forma análoga, representando $\ln\left(\frac{dP_t}{dt}\right)$ en función de $\ln[3-(2P_{med}/P_0)]$, se obtiene una recta de pendiente α.

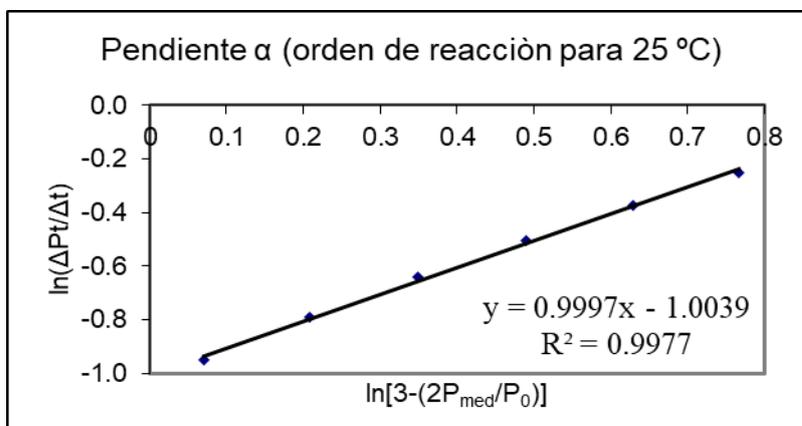


Figura 3. Recta de pendiente α a 15°C, calculados mediante método diferencial

Mediante método diferencial y regresión lineal representados en la Figura 3 se obtienen valores de: $\alpha = 0,9997 \approx 1$, $a = -1,0039$ Por lo tanto, el orden de reacción es 1 (uno). Y mediante la ecuación (18), la calcula la constante de velocidad k para 25 °C, es $k_{25^\circ\text{C}} = 0,27713 \text{ min}^{-1}$.

Tabla 6: Determinación del orden de reacción de H₂O₂ a 30 °C mediante método diferencial

t(min)	Pt	ΔPt	Δt	Ln (ΔPa/ΔT)	Pmed	Ln[3-(2P _{med} /P ₀)]
0,5	0,73718					
1,0	1,40400	0,666825	0,50	0,287920	1,070588	8,76E-01
1,5	1,99553	0,591525	0,50	0,168096	1,699763	7,17E-01
2,0	2,50860	0,513075	0,50	0,025814	2,252063	5,53E-01
2,5	2,94188	0,433275	0,50	-0,143235	2,725238	3,88E-01
3,0	3,29580	0,353925	0,50	-0,345523	3,118838	2,26E-01
3,5	3,57263	0,276825	0,50	-0,591223	3,434213	7,46E-02

Procediendo como en los dos casos anteriores se obtiene la Figura 4:

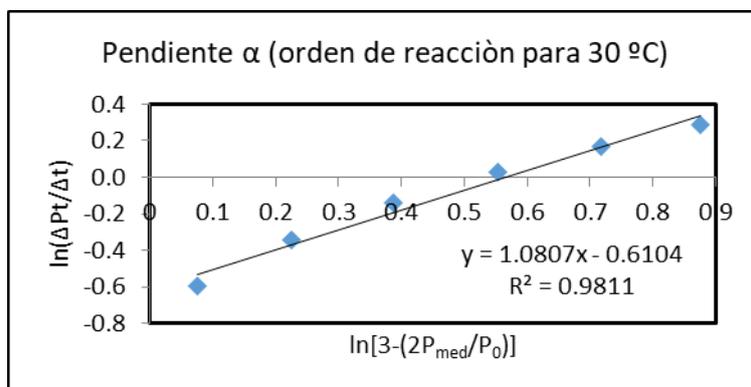


Figura 4. Recta de pendiente α a 30°C, calculados mediante método diferencial

Mediante método diferencial y regresión lineal representados en la Figura 4 se obtienen valores de: $\alpha = 1,0807 \approx 1$, $a = -0,6104$ Por lo tanto, el orden de reacción es **1 (uno)**. Por la ecuación (18), la calcula la constante de velocidad k para 30 °C, es $k_{30^\circ\text{C}} = 0,343505 \text{ min}^{-1}$.

3.3. Determinación de ecuaciones de diseño y gráfica de curva de reacción

3.3.1. Reactor Bach isobárico a volumen constante

Ecuación de diseño para volumen constante:

$$\frac{dZ}{d\tau} = r\left(\frac{t_{ct}}{C_0}\right) \tag{21}$$

Velocidad de reacción para primer orden:

$$r = kC_0(1 - Z) \tag{22}$$

Reemplazando (2) en (1)

$$\frac{dZ}{dr} = kC_0(1 - Z)\left(\frac{t_{ct}}{C_0}\right), \text{ simplificando:}$$

$$\frac{dZ}{dr} = k(1 - Z)t_{ct}, \text{ como } t_{cr} = 1/k, \text{ la ecuación anterior queda:}$$

$$\frac{dZ}{dr} = (1 - Z) \tag{23}$$

Separando variables e integrando:

$$\tau = \int_0^Z \frac{dz}{(1-Z)}$$

$$\tau = -\ln(1 - Z) \quad (24)$$

Donde la ecuación (24) es la ecuación de diseño para calcular τ , siendo la curva de reacción la siguiente:

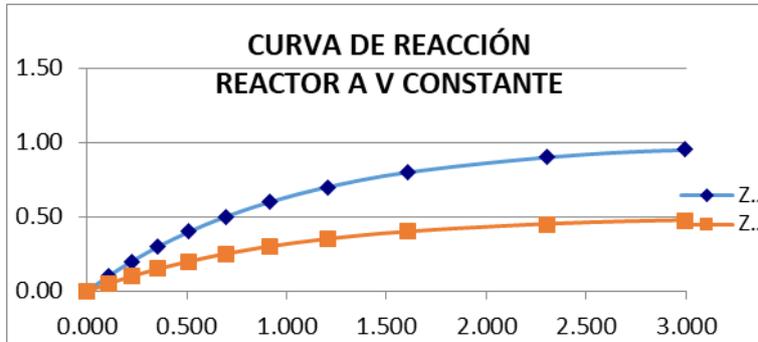


Figura 5. Curva de reacción para reactor Bach a volumen constante

Tabla 7: Curva de reacción a volumen constante

Curva de reacción		
τ	ZB	ZC
0,000	0,00	0,00
0,105	0,10	0,05
0,223	0,20	0,10
0,357	0,30	0,15
0,511	0,40	0,20
0,693	0,50	0,25
0,916	0,60	0,30
1,204	0,70	0,35
1,609	0,80	0,40
2,303	0,90	0,45
2,996	0,95	0,48
4,605	0,99	0,50

Las ecuaciones para calcular las composiciones son las siguientes:

Para A: $\frac{N_A(\tau)}{(N_{tot})_0} = 1 - Z$

$$N_A(\tau) = (N_{TOTAL})_0 [1 - Z] \quad (25)$$

Para B: $\frac{N_B(\tau)}{(N_{tot})_0} = Z$

$$N_B(\tau) = (N_{TOTAL})_0 Z \quad (26)$$

Para C: $\frac{N_C(\tau)}{(N_{tot})_0} = 0,5 \cdot Z$

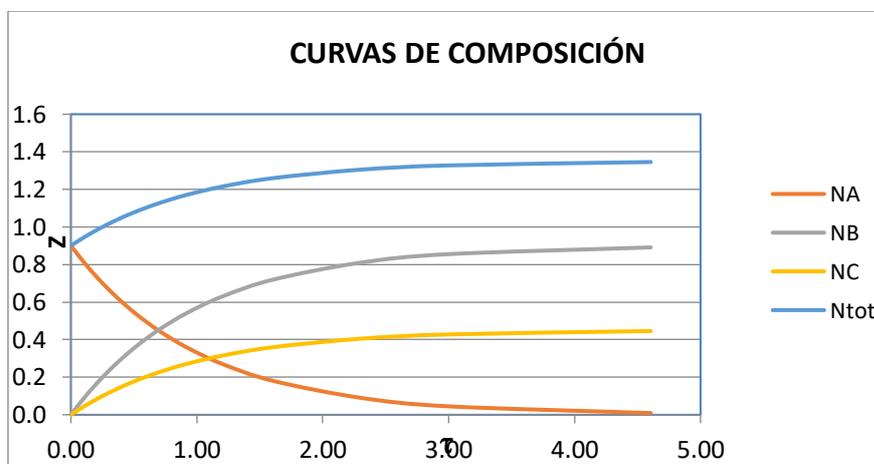
$$N_C(\tau) = (N_{TOTAL})_0 0,5 \cdot Z \quad (27)$$

$$(N_{TOTAL})_t = (N_{TOTAL})_0 [1 + 0,5Z] \quad (28)$$

Tabla 8: componentes para reactor a volumen constante

Z	τ	NA	NB	NC	N _{tot}
0	0,000	0,9	0,00	0,00	0,900
0,1	0,105	0,8	0,09	0,05	0,945
0,2	0,223	0,7	0,18	0,09	0,990
0,3	0,357	0,6	0,27	0,14	1,035
0,4	0,511	0,5	0,36	0,18	1,080
0,5	0,693	0,5	0,45	0,23	1,125
0,6	0,916	0,4	0,54	0,27	1,170
0,7	1,204	0,3	0,63	0,32	1,215
0,8	1,609	0,2	0,72	0,36	1,260
0,9	2,303	0,1	0,81	0,41	1,305
0,95	2,996	0,0	0,86	0,43	1,328
0,99	4,605	0,0	0,89	0,45	1,346

Las correspondientes gráficas por componentes son:

**Figura 6.** Curva de composición por componentes

3.4. Reactor Batch isobárico a volumen variable

Las ecuaciones de diseño para batch isobárico a volumen variable son las mismas que para volumen constante:

Aplicaciones Reactores Batch Isobárico para volumen constante y volumen variable

Utilizando ecuación cinética obtenida en el estudio para una temperatura, 30° C (303 K), y una presión de 0,68 atm, para una carga de 90 moles de reactante en un reactor batch isobárico a volumen constante; se determinó el tiempo necesario para alcanzar un 90 % de la composición, el procedimiento es:

$$\text{La composición es: } Z = -\frac{y_A(0)}{s_A} f_A = -\frac{1}{-1} 0,9 = 0,9$$

$$\text{Para ese valor de } Z, \tau = -\ln(1 - 0,9) = 2,303$$

Tiempo característico

$$t_{cr} = 1/k = 1/0,343505 = 2,9112$$

El tiempo necesario para alcanzar un 90% de la composición resultó:

$$t = t_{cr} \tau = 2,9112 \times 2,303 = 6,70321 \text{ min}$$

Seguidamente al realizar el cálculo del tiempo de operación para alcanzar un 50% de conversión en un Reactor Isobárico de volumen variable se obtuvo:

$$\text{La composición es: } Z = -\frac{y_A(0)}{s_A} f_A = -\frac{1}{-1} 0,5 = 0,5$$

Para ese valor de Z , $\tau = -\ln(1 - 0,5) = 0,693$

Tiempo característico

$$t_{cr} = 1/k = 1/0,343505 = 2,9112$$

El tiempo necesario para alcanzar un 50% de la composición es:

$$t = t_{cr} \tau = 2,9112 \times 0,693 = 2,0179 \text{ min}$$

4. Discusión

El orden de la reacción obtenida de acuerdo con las Figuras 2, 3 y 4 fue de uno, resultado que concuerda ampliamente con la literatura. Los datos se evaluaron mediante el método diferencial y para facilitar los cálculos se simuló en una plantilla Excel, mediante la extensión de Visual Basic For Applications, donde su utilidad de este soporte es automatizar tareas cotidianas, así como en la solución de ecuaciones no lineales y ecuaciones diferenciales, como fue el caso del presente estudio.

Efecto de la temperatura

Las velocidades de las reacciones son muy sensibles a la temperatura, de acuerdo con las Figuras 2, 3 y 4 se observa que dichas constantes de velocidad aumentan con la temperatura.

Tabla 9: Variación de la constante de velocidad en función de la temperatura

T (K)	R ²	Orden de reacción	k (min ⁻¹)
288	0,9970	1,0033	0,08264916
298	0,9977	0,9997	0,277130
303	0,9811	1,0807	0,343505

En la Tabla 10 se muestran que, la constante de velocidad aumenta a medida que la temperatura aumenta de 288 a 303 K.

A partir de los datos de la Tabla 10 se verifica que el orden de reacción de la descomposición del Peróxido de oxígeno cada caso se estimó en uno.

Por otra parte, a partir de los datos de la Tabla 10 se calculó la energía de activación, mediante ecuación de Arrhenius, siendo su valor de 86,33 kJ/mol. Esta observación es concordante con resultados reportados por la literatura, que es aproximadamente 75-80 kJ/mol y superior a lo reportado por Paternina et al. (2009), que es aproximadamente igual a 27 kJ/mol.

Conclusiones

Se modeló y simuló el estudio cinético de la descomposición del Peróxido de Hidrógeno en un reactor tipo CSTR.

Se determinaron las presiones parciales del Oxígeno (Tablas 1, 2 y 3), para ello se realizaron corridas a partir de la presión total en un reactor CSTR para temperaturas de 15°C, 25°C y 30 °C y se determinaron las respectivas gráficas señaladas en las figuras 2, 3 y 4

Se determinaron las constantes de velocidad K de la descomposición del peróxido de Hidrógeno en un reactor CSTR, para temperaturas de 15, 25 y 30 °C siendo 0,08264916; 0,277130 y 0,3435010 min⁻¹ respectivamente, donde el orden de reacción encontrado en cada caso fue de uno. En base

a esos resultados se encontró que la Energía de Activación E_a para la descomposición del peróxido de Hidrógeno utilizando Dicromato de Potasio como catalizador, fue de 86,36 kJ/mol.

Se determinaron las ecuaciones de diseño y las gráficas de la curva de reacción para un reactor Bach isobárico a volumen constante y volumen variable (Figuras 5 y 6).

Financiamiento

Financiado como parte de los Proyectos de Investigación con incentivos a nivel de Facultades 2023 correspondiente a la Facultad de Ingeniería Industrial y Sistemas de la Universidad Nacional Federico Villarreal.

Conflicto de intereses

Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.

Contribución de autoría

D-C, A.E., B-E, M. V., J-B, L., P-L, J. P. y F-A, J. M.: Conceptualización, análisis formal, investigación, escritura (preparación del borrador final) y supervisión.

B-E, M. V.: Investigación, metodología y curación de datos.

D-C, A.E., B-E, M. V. y J-B, L.: Tratamiento de datos.

P-L, J. P. y F-A, J. M.: Investigación, recopilación de datos.

Referencias bibliográficas

- Aguilar Muñoz, M. L., & Durán Torres, C. (2011). Química recreativa con agua oxigenada. *Revista Eureka Sobre Enseñanza y Divulgación de Las Ciencias.*, 8(extra), 446–453. https://doi.org/10.25267/Rev_Eureka_ensen_divulg_cienc.2011.v8.iextra.11
- Ancheyta Juarez, J. (2016). *Cinética Química para Sistemas Homogeneos* (2nd ed.). Instituto Politecnico Nacional.
- Corona, L., Sigüenza, A., Ubici, V., Gómez, E. G., & Ortega, W. (2015). *Cinética de descomposición de peróxido de hidrógeno con catalasa.* 2(1), 1–5. https://www.academia.edu/11644450/Cinética_de_descomposición_de_peróxido_de_hidrógeno_con_catalasa
- De la Macorra, C., Brizard, A., Rincón, P., & Sánchez, R. (2004). Estudio cinético de la descomposición del peróxido de hidrógeno en condiciones de alcalinidad. *Tecnología y Desarrollo*, 2(0), 13. https://revistas.uax.es/index.php/tec_des/article/view/511/467
- Fogler, H. (2013). *Elementos de ingenierías de las reacciones químicas* (4th ed.). Prentice Hall.
- Jimenez Medina, L. A., & Serna Velasquez, P. A. (2017). Cinética de la descomposición del Peróxido de Hidrógeno. *Laboratorio de Química de La Universidad de Antioquia.* <https://www.docsity.com/es/cinetica-de-descomposicion-del-peroxido-de-hidrogeno/5798431/>
- Kimbrough, D. R., Magoun, M. A., & Langfur, M. (1997). Un experimento de laboratorio que investiga diferentes aspectos de la actividad de la catalasa en un enfoque basado en la investigación. *Revista de Educación Química*, 74, 210–212. <https://www.semanticscholar.org/paper/A-Laboratory-Experiment-Investigating-Different-of-Kimbrough-Magoun/617c80dd2c1370ac1c16be976eede67edcc4d1a9>
- Levenspiel, O. (1987). *Ingeniería de las Reacciones Químicas* (1st ed.). Editorial Reverté, S.A.

- Paternina, E., M. Arias, J., & Barragán, D. (2009). Estudio cinético de la descomposición catalizada de peróxido de hidrógeno sobre carbón activado. *Química Nova*, 32(4), 934–938. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422009000400020>
- Pędziwiatr, P. (2018). Descomposicion del Peroxido de Hidrogeno-Cinetica y revision de los catalizadores seleccionados. *Acta Innovations*, 26, 45–52. <https://www.ceeol.com/search/article-detail?id=596456>
- Sánchez Manzanares, J. A. (2011). *Física y Química Volumen Práctico* (1st ed.). EDITORIAL MAD.
- Sarría, V., Parra, S., Invernizzi, S., Peringer, P., & Pulgarin, C. (2001). Photochemical-biological treatment of a real industrial biorecalcitrant wastewater containing 5-amino-6-methyl-2-benzimidazolone. *Water Sci and Technol*, 44(5), 93–101. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/11695489/>
- Smith, J. M. (1991). *Ingeniería de la Cinética Química* (6th ed.). MCGRAW-HILL.
- Soto, A. (2003). *Apuntes de Cinética Química* (p. 23). Curso de Físicoquímica. <https://www.inglomayor.cl/2/pierre/pdf/026.pdf>
- Velastegui, G., & Toapanta Vargas, G. J. (2018). *Aplicación de peróxido de hidrógeno para el control de oidio (Oidium sp.) en el cultivo de mora (Rubus glaucus Benth.) bajo cubierta plástica*. [Universidad Técnica de Ambato]. <https://repositorio.uta.edu.ec/jspui/handle/123456789/28030>