

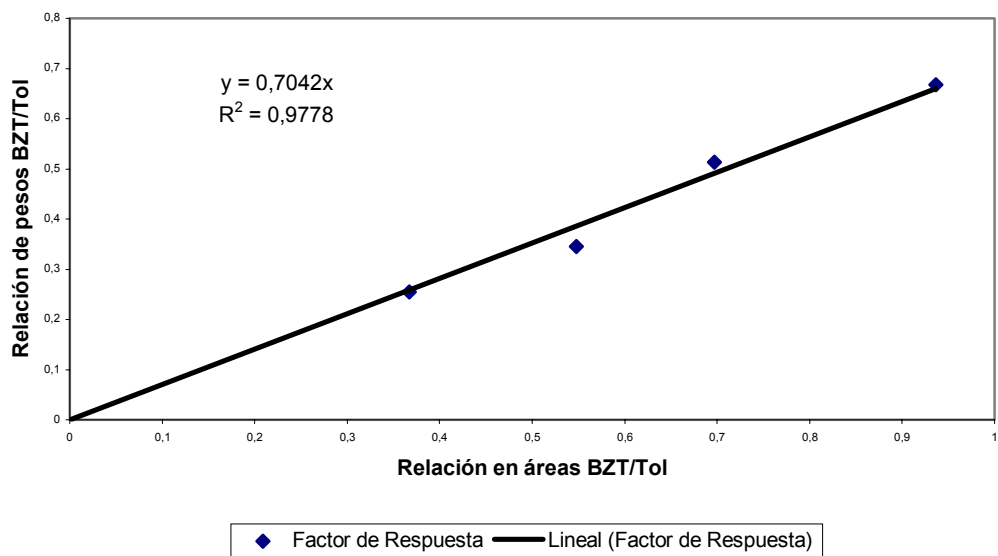
## 9.- APÉNDICE

### 9.1.- FACTOR DE RESPUESTA

El cálculo del factor de respuesta (Fr) del BzMe fue realizado a partir de cuatro mezclas preparadas a diferentes composiciones entre el BzMe y el tolueno (Tol) (ver tabla 26), y a través de los cromatogramas de cada una de ellas se relacionan los porcentajes de las áreas integradas entre ambos compuestos con las correspondientes relaciones entre los porcentajes en peso de las mezclas. Al graficar relaciones se obtiene una línea recta que pasa por el origen cuya pendiente es el valor buscado de Fr, que nos permitirá determinar de forma precisa la cantidad de éster formado durante la reacción. A continuación se presenta una tabla y la figura con los datos de las mezclas que se utilizaron<sup>(26)</sup>.

**TABLA 26.** Datos de las mezclas utilizadas para determinar el factor de respuesta.

Relación BzMe/Tol [gr/gr]	Relación de áreas BzMe/Tol
0,6676	0,9365
0,2553	0,3674
0,5134	0,6968
0,3454	0,5479



**FIGURA 52.** Factor de respuesta

## 9.2.- CONVERSIÓN MOLAR

El cálculo de la conversión utilizando las siguientes ecuaciones <sup>(26)</sup>:

Primero se calcula la cantidad de producto obtenido:

$$n_{BzMe} = \frac{Area_{BzMe} * Fr * m_{Tol}}{Area_{Tol} * PM_{BzMe}}$$

Donde:

Área<sub>BzMe</sub>: área del benzoato de metilo reportada por el integrador del cromatógrafo.

Área<sub>Tol</sub>: área Tolueno reportada por el integrador del cromatógrafo.

Fr: Factor de respuesta del benzoato de metilo.

m<sub>Tol</sub>: masa de tolueno añadido a la mezcla de reacción en gr mol.

n<sub>BzMe</sub>: moles formados de benzoato de metilo en gr mol.

PM<sub>BzMe</sub>: peso molecular del benzoato de metilo en gr/gr mol.

Finalmente se determina la conversión molar a través de la siguiente ecuación:

$$\%Conversion.molar = \frac{n_{BzMe}}{m_{AcBz} / PM_{AcBz}} * 100$$

Donde:

M<sub>AcBz</sub>: masa de ácido benzoico a convertir en gr.

PM<sub>AcBz</sub>: peso molecular del compuesto BzMe en gr/gr mol.

### 9.3.- VELOCIDAD DE CONVERSIÓN POR SITIO ÁCIDO

La velocidad de conversión por sitio ácido de las zeolitas fue determinada en base a la relación Si/Al total y suponiendo que por cada átomo de aluminio se tiene un protón o sitio ácido Brönsted.

Se normalizó la masa de catalizador utilizando un factor de corrección basado en las pérdidas de cristalinidad y variaciones del área (para la zeolita patrón en el caso del sólido desaluminado).

Para una relación Si/Al se determinan los moles de sitios por masa de catalizador a través de la siguiente ecuación:

$$S_H = \frac{H^+ [AlO_2(SiO_2)_r]}{[PM_H + PM_{Al} + (2 + r) \cdot PM_O + r \cdot PM_{Si}]}$$

Donde:

$PM_X$ : Peso molecular del elemento x.

$S_H$ : Sitios ácidos en mol por gramo de catalizador deshidratado.

La cantidad de sitios ácidos se determina de la siguiente manera:

$$C_H = S_H \cdot m \cdot f_c \cdot A_{S, \text{ desluminado}} / A_{\text{ sólido sin desaluminar}}$$

Donde:

$C_H$ : Cantidad de sitios ácidos, moles.

$f_c$ : Fracción cristalina de la zeolita.

m: masa de sólido, gramos.

$A_{S, \text{ desluminado}}$ : Área superficial específica del sólido desaluminado,  $m^2/\text{gr}$ .

$A_{\text{ sólido sin desaluminar}}$ : Área superficial específica del sólido sin desaluminar,  $m^2/\text{gr}$ .

Por último, se determina la velocidad de conversión por sitio ácido:

$$v_H = n_{BzMe} / (C_H * t)$$

Donde:

t: Tiempo de reacción, horas.

$v_H$ : Velocidad de conversión por sitio ácido,  $hr^{-1}$ .

#### 9.4.- ACTIVIDAD CATALÍTICA DE LOS SÓLIDOS

La actividad catalítica de cada sólido fue determinada en base a la conversión y al tiempo de reacción. Esta se determinó a partir de la siguiente ecuación:

$$A_C = (X_S * n_{AB}) / (m)$$

Donde:

$A_C$ : Actividad catalítica del sólido, mol/ (h\*gr).

$X_S$ : Conversión.

$n_{AB}$ : Moles de ácido benzoico empleados en la reacción.