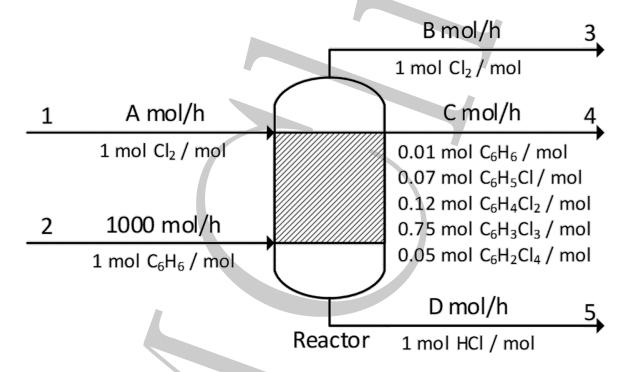
Problema 15. La cloración de benceno produce una mezcla de productos mono, di, tri y tetraclorobenceno sustituidos mediante la cadena de reacciones:

$$\begin{split} & C_6H_6 + Cl_2 \longrightarrow C_6H_5Cl + HCl \\ & C_6H_5Cl + Cl_2 \longrightarrow C_6H_4Cl_2 + HCl \\ & C_6H_4Cl_2 + Cl_2 \longrightarrow C_6H_3Cl_3 + HCl \\ & C_6H_3Cl_3 + Cl_2 \longrightarrow C_6H_2Cl_4 + HCl \end{split}$$

El producto primario de la cloración es triclorobenceno, que se vende como producto para la limpieza de textiles, aunque es inevitable la producción conjunta de otros clorobencenos. Supóngase que una alimentación por separado, con una proporción de  $\text{Cl}_2$  a  $\text{C}_6\text{H}_6$  de 3.6 a 1 resulta en un producto con la siguiente composición (considérese que el  $\text{Cl}_2$  y el HCl salen por separado): benceno ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ) 1%, clorobenceno ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$ ) 7%, diclorobenceno ( $\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$ ) 12%, triclorobenceno ( $\text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3$ ) 75% y tetraclorobenceno ( $\text{C}_6\text{H}_2\text{Cl}_4$ ) 5%. Si se cargan al reactor 1000 mol/h de benceno, calcular los moles/h de subproductos de HCl y de producto primario,  $\text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3$  producidos.



Como es un proceso continuo en estado estacionario reaccionante, entonces la ecuación general de balance en el sistema es:

• Reactivos:

$$\label{eq:consumo} \begin{aligned} \text{Entrada} + \frac{\text{Generación}}{\text{Centrada}} - \text{Salida} - \text{Consumo} &= \frac{\text{Acumulación}}{\text{Consumo}} \\ &= \text{Salida} + \text{Consumo} \end{aligned}$$

• Productos:

$$\label{eq:entrada} \begin{split} \text{Entrada} + \text{Generación} &- \text{Salida} - \frac{\text{Consumo}}{\text{Consumo}} = \frac{\text{Acumulación}}{\text{Entrada}} \\ &= \text{Salida} - \text{Generación} \end{split}$$

Sean  $\xi_1$ ,  $\xi_2$   $\xi_3$  y  $\xi_4$  los grados de avance de la primera, segunda, tercera y cuarta reacción, respectivamente. Ecuaciones independientes (8):

• Balance de Cl<sub>2</sub>:

$$\label{eq:corriente} Corriente \ 1 = Corriente \ 3 + Consumo \\ (A \ mol/h)(1 \ mol \ Cl_2/mol) = (B \ mol/h)(1 \ mol \ Cl_2/mol) + \xi_1 \ mol/h \ Cl_2 + \xi_2 \ mol/h \ Cl_2 + \xi_3 \ mol/h \ Cl_2 + \xi_4 \ mol/h \ Cl_2 \\$$

• Balance de C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>:

$$Corriente~2=Corriente~4+Consumo\\ (1000~mol/h)(1~mol~C_6H_6/mol)=(C~mol/h)(0.01~mol~C_6H_6/mol)+\xi_1~mol/h~C_6H_6$$

• Balance de C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Cl:

$$0 = Corriente \ 4 - Generación + Consumo \\ 0 \ mol/h \ C_6H_5Cl = (C \ mol/h)(0.07 \ mol \ C_6H_5Cl/mol) - \xi_1 \ mol/h \ C_6H_5Cl + \xi_2 \ mol/h \ C_6H_5Cl$$

• Balance de  $C_6H_4Cl_2$ :

$$0 = Corriente~4 - Generación + Consumo\\ 0~mol/h~C_6H_4Cl_2 = (C~mol/h)(0.12~mol~C_6H_4Cl_2/mol) - \xi_2~mol/h~C_6H_4Cl_2 + \xi_3~mol/h~C_6H_4Cl_2$$

• Balance de C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>Cl<sub>3</sub>:

$$0 = Corriente \ 4 - Generación + Consumo \\ 0 \ mol/h \ C_6H_3Cl_3 = (C \ mol/h)(0.75 \ mol \ C_6H_3Cl_3/mol) - \xi_3 \ mol/h \ C_6H_3Cl_3 + \xi_4 \ mol/h \ C_6H_3Cl_3$$

• Balance de C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>:

$$0 = Corriente \ 4 - Generación$$
0 mol/h C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub> = (C mol/h)(0.05 mol C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>/mol) -  $\xi_4$  mol/h C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>

• Balance de HCl:

$$0= {\rm Corriente}\ 5 \ -\ {\rm Generación}$$
0 mol/h HCl = (D mol/h)(1 mol HCl/mol) -  $\xi_1$  mol/h HCl -  $\xi_2$  mol/h HCl -  $\xi_3$  mol/h HCl -  $\xi_4$  mol/h HCl

• Relación molar de Cl<sub>2</sub> y C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>:

$$\frac{3.6~\text{mol}~\text{Cl}_2/\text{h}~\text{entrada}}{1~\text{mol}~\text{C}_6\text{H}_6/\text{h}~\text{entrada}} = \frac{(A~\text{mol/h})(1~\text{mol}~\text{Cl}_2/\text{mol})}{(1000~\text{mol/h})(1~\text{mol}~\text{C}_6\text{H}_6/\text{mol})}$$

En donde hay 8 incógnitas =  $\{A, B, C, D, \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4\}$ . Entonces, el grado de libertad es:

$$\mathrm{GL}=\#$$
 Incógnitas -  $\#$  Ecuaciones independientes =  $8$  -  $8=0$ 

Por lo que el sistema tiene solución única.

Con la relación molar de de  $Cl_2$  y  $C_6H_6$ :

$$\frac{3.6 \ \, mol \ \, Cl_2/h \ \, entrada}{1 \ \, mol \ \, C_6H_6/h \ \, entrada} = \frac{(A \ \, mol/h)(1 \ \, mol \ \, Cl_2/mol)}{(1000 \ \, mol/h)(1 \ \, mol \ \, C_6H_6/mol)}$$
 
$$A \ \, mol/h = \frac{(3.6 \ \, mol \ \, Cl_2/h)(1000 \ \, mol/h)(1 \ \, mol \ \, C_6H_6/mol)}{(1 \ \, mol \ \, C_6H_6/h)(1 \ \, mol \ \, Cl_2/mol)} = 3600 \ \, mol/h$$

Sumando el balance de  $C_6H_6$ ,  $C_6H_5Cl$ ,  $C_6H_4Cl_2$ ,  $C_6H_3Cl_3$  y  $C_6H_2Cl_4$  (sea  $\beta = [C_6H_6 + C_6H_5Cl + C_6H_4Cl_2 + C_6H_3Cl_3 + C_6H_2Cl_4]$ ):

1000 mol/h 
$$\beta$$
 = (C mol/h)(1 mol  $\beta$ /mol)  
C mol/h = 1000 mol/h

En el balance de  $C_6H_2Cl_4$ :

$$\begin{array}{l} 0 \; \mathrm{mol/h} \; C_6 H_2 C l_4 = (1000 \; \mathrm{mol/h}) (0.05 \; \mathrm{mol} \; C_6 H_2 C l_4 / \mathrm{mol}) \; \text{--} \; \xi_4 \; \mathrm{mol/h} \; C_6 H_2 C l_4 \\ \xi_4 \; \mathrm{mol/h} \; C_6 H_2 C l_4 = (1000 \; \mathrm{mol/h}) (0.05 \; \mathrm{mol} \; C_6 H_2 C l_4 / \mathrm{mol}) = 50 \; \mathrm{mol/h} \; C_6 H_2 C l_4 \\ \end{array}$$

En el balance de  $C_6H_3Cl_3$ :

 $0 \; mol/h \; C_6H_3Cl_3 = (1000 \; mol/h)(0.75 \; mol \; C_6H_3Cl_3/mol) - \xi_3 \; mol/h \; C_6H_3Cl_3 + 50 \; mol/h \; C_6H_3Cl_3 \\ \xi_3 \; mol/h \; C_6H_3Cl_3 = (1000 \; mol/h)(0.75 \; mol \; C_6H_3Cl_3/mol) + 50 \; mol/h \; C_6H_3Cl_3 = 800 \; mol/h \; C_6H_3Cl_3$ 

En el balance de  $C_6H_4Cl_2$ :

 $0 \; mol/h \; C_6H_4Cl_2 = (1000 \; mol/h)(0.12 \; mol \; C_6H_4Cl_2/mol) - \xi_2 \; mol/h \; C_6H_4Cl_2 + 800 \; mol/h \; C_6H_4Cl_2 \\ \xi_2 \; mol/h \; C_6H_4Cl_2 = (1000 \; mol/h)(0.12 \; mol \; C_6H_4Cl_2/mol) + 800 \; mol/h \; C_6H_4Cl_2 = 920 \; mol/h \; C_6H_4Cl_2$ 

En el balance de  $C_6H_5Cl$ :

 $0 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) - \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl = 990 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C_6H_5Cl \\ \xi_1 \; mol/h \; C_6H_5Cl = (1000 \; mol/h)(0.07 \; mol \; C_6H_5Cl/mol) + 920 \; mol/h \; C$ 

En el balance de HCl:

$$0 \ \text{mol/h HCl} = (D \ \text{mol/h})(1 \ \text{mol HCl/mol}) - 990 \ \text{mol/h HCl} - 920 \ \text{mol/h HCl} - 800 \ \text{mol/h HCl} - 50 \ \text{mol/h HCl} + 600 \ \text{mol/h HCl} + 800 \ \text{mol/h} + 80$$

En el balance de  $Cl_2$ :

$$(3600 \; mol/h)(1 \; mol \; Cl_2/mol) = (B \; mol/h)(1 \; mol \; Cl_2/mol) + 990 \; mol/h \; Cl_2 + 920 \; mol/h \; Cl_2 + 800 \; mol/h \; Cl_2 + 50 \; mol/h \; Cl_2 \\ B \; mol/h = \frac{(3600 \; mol/h)(1 \; mol \; Cl_2/mol) - 990 \; mol/h \; Cl_2 - 920 \; mol/h \; Cl_2 - 800 \; mol/h \; Cl_2 - 50 \; mol/h \; Cl_2}{1 \; mol \; Cl_2/mol} \\ B \; mol/h = 840 \; mol/h$$

Flujo molar (mol/h)					
	1	2	3	4	5
$Cl_2$	3600	0	840	0	0
$C_6H_6$	0	1000	0	10	0
$C_6H_5Cl$	0	0	0	70	0
$C_6H_4Cl_2$	0	0	0	120	0
$C_6H_3Cl_3$	0	0	0	750	0
$C_6H_2Cl_4$	0	0	0	50	0
HCl	0	0	0	0	2760
Total	3600	1000	840	1000	2760

En la salida se obtienen 2760 mol/h de subproductos de HCl y 750 mol/h de producto primario C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>Cl<sub>3</sub>.