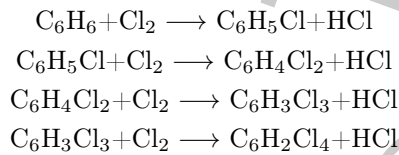
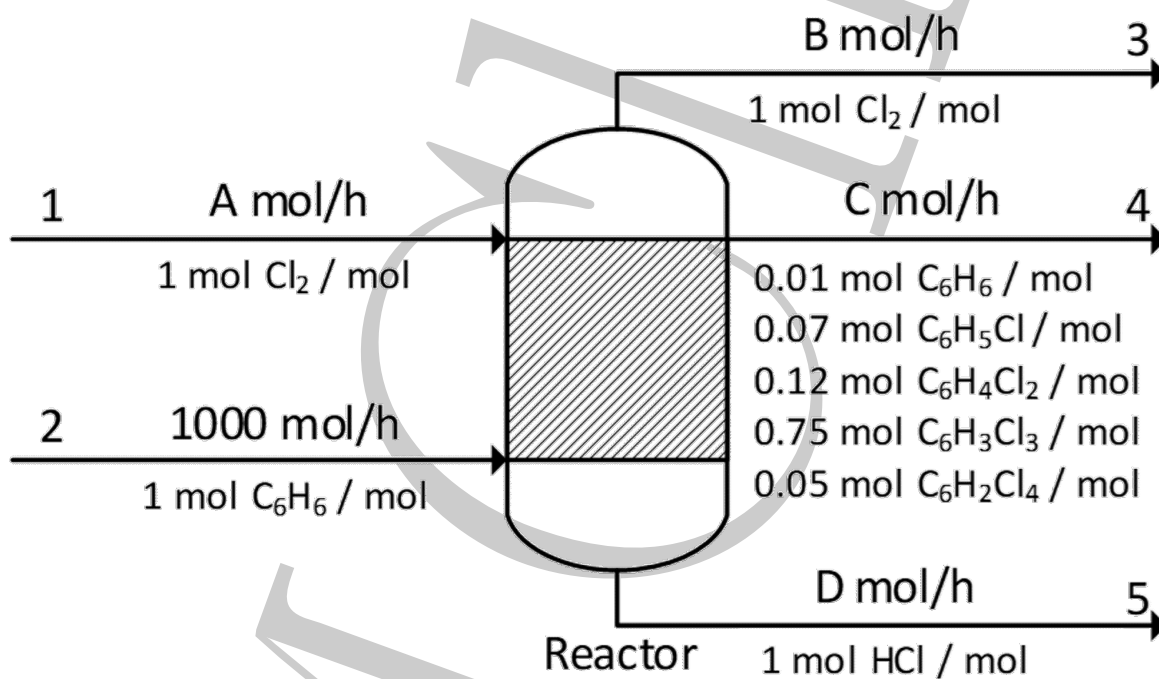


Problema 15. La cloración de benceno produce una mezcla de productos mono, di, tri y tetraclorobenceno sustituidos mediante la cadena de reacciones:



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 Cl_2 a C_6H_6 de 3.6 a 1 resulta en un producto con la siguiente composición (considérese que el Cl_2 y el HCl salen por separado): benceno (C_6H_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:

$$\begin{aligned} \text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} &= \text{Acumulación} \\ \text{Entrada} &= \text{Salida} + \text{Consumo} \end{aligned}$$

- Productos:

$$\begin{aligned} \text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} &= \text{Acumulación} \\ \text{Entrada} &= \text{Salida} - \text{Generación} \end{aligned}$$

Sean ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 y ξ_4 los grados de avance de la primera, segunda, tercera y cuarta reacción, respectivamente. Ecuaciones independientes (8):

- Balance de Cl_2 :

$$\text{Corriente 1} = \text{Corriente 3} + \text{Consumo}$$

$$(A \text{ mol/h})(1 \text{ mol Cl}_2/\text{mol}) = (B \text{ mol/h})(1 \text{ mol Cl}_2/\text{mol}) + \xi_1 \text{ mol/h Cl}_2 + \xi_2 \text{ mol/h Cl}_2 + \xi_3 \text{ mol/h Cl}_2 + \xi_4 \text{ mol/h Cl}_2$$

- Balance de C_6H_6 :

$$\begin{aligned} \text{Corriente 2} &= \text{Corriente 4} + \text{Consumo} \\ (1000 \text{ mol/h})(1 \text{ mol } C_6H_6/\text{mol}) &= (C \text{ mol/h})(0.01 \text{ mol } C_6H_6/\text{mol}) + \xi_1 \text{ mol/h } C_6H_6 \end{aligned}$$

- Balance de C_6H_5Cl :

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Corriente 4} - \text{Generación} + \text{Consumo} \\ 0 \text{ mol/h } C_6H_5Cl &= (C \text{ mol/h})(0.07 \text{ mol } C_6H_5Cl/\text{mol}) - \xi_1 \text{ mol/h } C_6H_5Cl + \xi_2 \text{ mol/h } C_6H_5Cl \end{aligned}$$

- Balance de $C_6H_4Cl_2$:

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Corriente 4} - \text{Generación} + \text{Consumo} \\ 0 \text{ mol/h } C_6H_4Cl_2 &= (C \text{ mol/h})(0.12 \text{ mol } C_6H_4Cl_2/\text{mol}) - \xi_2 \text{ mol/h } C_6H_4Cl_2 + \xi_3 \text{ mol/h } C_6H_4Cl_2 \end{aligned}$$

- Balance de $C_6H_3Cl_3$:

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Corriente 4} - \text{Generación} + \text{Consumo} \\ 0 \text{ mol/h } C_6H_3Cl_3 &= (C \text{ mol/h})(0.75 \text{ mol } C_6H_3Cl_3/\text{mol}) - \xi_3 \text{ mol/h } C_6H_3Cl_3 + \xi_4 \text{ mol/h } C_6H_3Cl_3 \end{aligned}$$

- Balance de $C_6H_2Cl_4$:

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Corriente 4} - \text{Generación} \\ 0 \text{ mol/h } C_6H_2Cl_4 &= (C \text{ mol/h})(0.05 \text{ mol } C_6H_2Cl_4/\text{mol}) - \xi_4 \text{ mol/h } C_6H_2Cl_4 \end{aligned}$$

- Balance de HCl:

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Corriente 5} - \text{Generación} \\ 0 \text{ mol/h HCl} &= (D \text{ mol/h})(1 \text{ mol HCl/mol}) - \xi_1 \text{ mol/h HCl} - \xi_2 \text{ mol/h HCl} - \xi_3 \text{ mol/h HCl} - \xi_4 \text{ mol/h HCl} \end{aligned}$$

- Relación molar de Cl_2 y C_6H_6 :

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

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

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

Por lo que el sistema tiene solución única.

Con la relación molar de Cl_2 y C_6H_6 :

$$\begin{aligned} \frac{3.6 \text{ mol } Cl_2/\text{h entrada}}{1 \text{ mol } C_6H_6/\text{h entrada}} &= \frac{(A \text{ mol/h})(1 \text{ mol } Cl_2/\text{mol})}{(1000 \text{ mol/h})(1 \text{ mol } C_6H_6/\text{mol})} \\ A \text{ mol/h} &= \frac{(3.6 \text{ mol } Cl_2/\text{h})(1000 \text{ mol/h})(1 \text{ mol } C_6H_6/\text{mol})}{(1 \text{ mol } C_6H_6/\text{h})(1 \text{ mol } Cl_2/\text{mol})} = 3600 \text{ mol/h} \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} 1000 \text{ mol/h } \beta &= (C \text{ mol/h})(1 \text{ mol } \beta/\text{mol}) \\ C \text{ mol/h} &= 1000 \text{ mol/h} \end{aligned}$$

En el balance de $C_6H_2Cl_4$:

$$\begin{aligned} 0 \text{ mol/h } C_6H_2Cl_4 &= (1000 \text{ mol/h})(0.05 \text{ mol } C_6H_2Cl_4/\text{mol}) - \xi_4 \text{ mol/h } C_6H_2Cl_4 \\ \xi_4 \text{ mol/h } C_6H_2Cl_4 &= (1000 \text{ mol/h})(0.05 \text{ mol } C_6H_2Cl_4/\text{mol}) = 50 \text{ mol/h } C_6H_2Cl_4 \end{aligned}$$

En el balance de $\text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3$:

$$0 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3 = (1000 \text{ mol/h})(0.75 \text{ mol } \text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3/\text{mol}) - \xi_3 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3 + 50 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3$$

$$\xi_3 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3 = (1000 \text{ mol/h})(0.75 \text{ mol } \text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3/\text{mol}) + 50 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3 = 800 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3$$

En el balance de $\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$:

$$0 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2 = (1000 \text{ mol/h})(0.12 \text{ mol } \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2/\text{mol}) - \xi_2 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2 + 800 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$$

$$\xi_2 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2 = (1000 \text{ mol/h})(0.12 \text{ mol } \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2/\text{mol}) + 800 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2 = 920 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$$

En el balance de $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$:

$$0 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = (1000 \text{ mol/h})(0.07 \text{ mol } \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}/\text{mol}) - \xi_1 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} + 920 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$$

$$\xi_1 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = (1000 \text{ mol/h})(0.07 \text{ mol } \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}/\text{mol}) + 920 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = 990 \text{ mol/h } \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$$

En el balance de HCl :

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

$$\text{D mol/h} = \frac{990 \text{ mol/h } \text{HCl} + 920 \text{ mol/h } \text{HCl} + 800 \text{ mol/h } \text{HCl} + 50 \text{ mol/h } \text{HCl}}{1 \text{ mol } \text{HCl}/\text{mol}}$$

$$\text{D mol/h} = 2760 \text{ mol/h}$$

En el balance de Cl_2 :

$$(3600 \text{ mol/h})(1 \text{ mol } \text{Cl}_2/\text{mol}) = (\text{B mol/h})(1 \text{ mol } \text{Cl}_2/\text{mol}) + 990 \text{ mol/h } \text{Cl}_2 + 920 \text{ mol/h } \text{Cl}_2 + 800 \text{ mol/h } \text{Cl}_2 + 50 \text{ mol/h } \text{Cl}_2$$

$$\text{B mol/h} = \frac{(3600 \text{ mol/h})(1 \text{ mol } \text{Cl}_2/\text{mol}) - 990 \text{ mol/h } \text{Cl}_2 - 920 \text{ mol/h } \text{Cl}_2 - 800 \text{ mol/h } \text{Cl}_2 - 50 \text{ mol/h } \text{Cl}_2}{1 \text{ mol } \text{Cl}_2/\text{mol}}$$

$$\text{B mol/h} = 840 \text{ mol/h}$$

Flujo molar (mol/h)					
	1	2	3	4	5
Cl_2	3600	0	840	0	0
C_6H_6	0	1000	0	10	0
$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	0	0	0	70	0
$\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$	0	0	0	120	0
$\text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3$	0	0	0	750	0
$\text{C}_6\text{H}_2\text{Cl}_4$	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 $\text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3$.