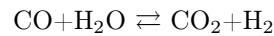
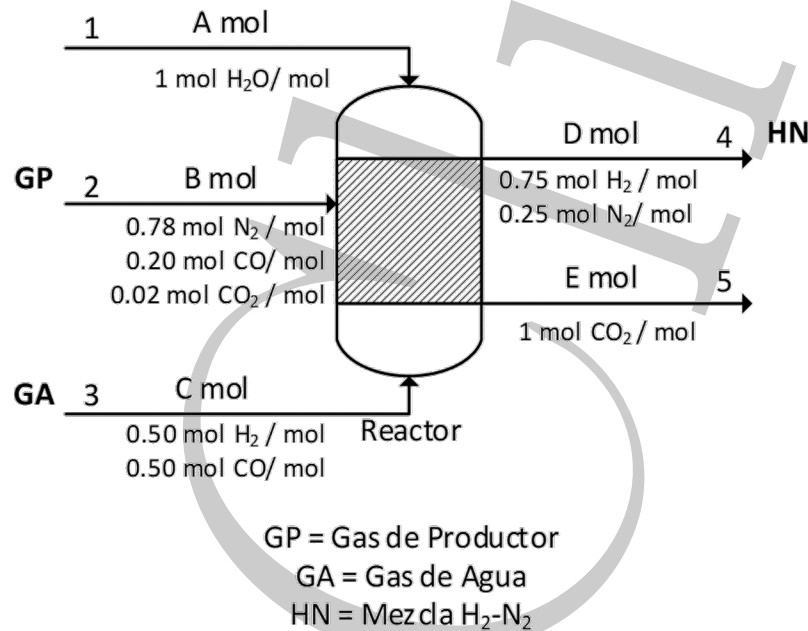


Problema 14. La mezcla estequiométrica de $\text{N}_2 - \text{H}_2$ (75 % H_2 – 25 % N_2) para la síntesis de amoníaco se prepara mezclando gas de “productor” (78 % N_2 – 20 % CO – 2 % CO_2) con gas de agua (50 % H_2 – 50 % CO). El monóxido de carbono, que actúa como veneno de catalizador de síntesis, se elimina haciendo reaccionar esta mezcla de gases de vapor de agua, para formar dióxido de carbono e hidrógeno mediante la reacción:



Posteriormente se elimina el CO_2 mediante lavado por absorción con solvente. Suponiendo que todas las composiciones están en porcentaje en mol y que se adiciona la cantidad precisa de vapor de agua para tener una conversión de CO al 100 %. Calcular la proporción en la que deberán mezclarse los gases de productor y agua.

Como la relación molar en la reacción química del $\text{CO} : \text{H}_2\text{O}$ es 1 : 1, entonces la conversión del H_2O es también del 100 %.



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

- Reactivos:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} = \text{Acumulación}$$

$$\text{Entrada} = \text{Salida} + \text{Consumo}$$

- Productos:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} = \text{Acumulación}$$

$$\text{Entrada} = \text{Salida} - \text{Generación}$$

- Inertes:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} = \text{Acumulación}$$

$$\text{Entrada} = \text{Salida}$$

Sea ξ el grado de avance de la reacción.

Ecuaciones independientes (5):

- Balance de N_2 :

$$\text{Corriente 2} = \text{Corriente 4}$$

$$(B \text{ mol})(0.78 \text{ mol } \text{N}_2/\text{mol}) = (D \text{ mol})(0.25 \text{ mol } \text{N}_2/\text{mol})$$

- Balance de H_2 :

$$\begin{aligned} \text{Corriente 3} &= \text{Corriente 4} - \text{Generación} \\ (C \text{ mol})(0.50 \text{ mol } H_2/\text{mol}) &= (D \text{ mol})(0.75 \text{ mol } H_2/\text{mol}) - \xi \text{ mol } H_2 \end{aligned}$$

- Balance de CO:

$$\begin{aligned} \text{Corriente 2} + \text{Corriente 3} &= \text{Consumo} \\ (B \text{ mol})(0.20 \text{ mol CO/mol}) + (C \text{ mol})(0.50 \text{ mol CO/mol}) &= \xi \text{ mol CO} \end{aligned}$$

- Balance de CO_2 :

$$\begin{aligned} \text{Corriente 2} &= \text{Corriente 5} - \text{Generación} \\ (B \text{ mol})(0.02 \text{ mol } CO_2/\text{mol}) &= (E \text{ mol})(1 \text{ mol } CO_2/\text{mol}) - \xi \text{ mol } CO_2 \end{aligned}$$

- Balance de H_2O :

$$\begin{aligned} \text{Corriente 1} &= \text{Consumo} \\ (A \text{ mol})(1 \text{ mol } H_2O/\text{mol}) &= \xi \text{ mol } H_2O \end{aligned}$$

En donde hay 6 incógnitas = $\{A, B, C, D, E, \xi\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

$$GL = \# \text{ Incógnitas} - \# \text{ Ecuaciones independientes} = 6 - 5 = 1$$

Por lo que hay que asignar una base de cálculo. Sea $B = 100$.

En el balance de N_2 :

$$\begin{aligned} (100 \text{ mol})(0.78 \text{ mol } N_2/\text{mol}) &= (D \text{ mol})(0.25 \text{ mol } N_2/\text{mol}) \\ D \text{ mol} &= \frac{(100 \text{ mol})(0.78 \text{ mol } N_2/\text{mol})}{0.25 \text{ mol } N_2/\text{mol}} = 312 \text{ mol} \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones simultáneas conformado por el balance de H_2 y el balance de CO:

$$\begin{aligned} (C \text{ mol})(0.50 \text{ mol } H_2/\text{mol}) &= (312 \text{ mol})(0.75 \text{ mol } H_2/\text{mol}) - \xi \text{ mol } H_2 = 234 \text{ mol } H_2 - \xi \text{ mol } H_2 \\ 234 \text{ mol } H_2 &= \xi \text{ mol } H_2 + (C \text{ mol})(0.50 \text{ mol } H_2/\text{mol}) \\ (100 \text{ mol})(0.20 \text{ mol CO/mol}) + (C \text{ mol})(0.50 \text{ mol CO/mol}) &= 20 \text{ mol CO} + (C \text{ mol})(0.50 \text{ mol CO/mol}) = \xi \text{ mol CO} \\ 20 \text{ mol CO} &= \xi \text{ mol CO} - (C \text{ mol})(0.50 \text{ mol CO/mol}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \xi \text{ mol} &= \begin{vmatrix} 234 & 0.50 \\ 20 & -0.50 \end{vmatrix} \text{ mol} = 127 \text{ mol} \\ C \text{ mol} &= \begin{vmatrix} 1 & 234 \\ 1 & 20 \end{vmatrix} \text{ mol} = 214 \text{ mol} \end{aligned}$$

En el balance de CO_2 :

$$\begin{aligned} (100 \text{ mol})(0.02 \text{ mol } CO_2/\text{mol}) &= (E \text{ mol})(1 \text{ mol } CO_2/\text{mol}) - 127 \text{ mol } CO_2 \\ E \text{ mol} &= \frac{(100 \text{ mol})(0.02 \text{ mol } CO_2/\text{mol}) + 127 \text{ mol } CO_2}{1 \text{ mol } CO_2/\text{mol}} = 129 \text{ mol} \end{aligned}$$

En el balance de H_2O :

$$(A \text{ mol})(1 \text{ mol } H_2O/\text{mol}) = 127 \text{ mol } H_2O$$

La proporción molar de GP : GA es 100 : 214.

| Cantidad molar (mol) | | | | | |
|----------------------|-----|-----|-----|-----|-----|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
| N ₂ | 0 | 78 | 0 | 78 | 0 |
| H ₂ | 0 | 0 | 107 | 234 | 0 |
| CO | 0 | 20 | 107 | 0 | 0 |
| CO ₂ | 0 | 2 | 0 | 0 | 129 |
| H ₂ O | 127 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Total | 127 | 100 | 214 | 312 | 129 |