

BALANCES DE MATERIA CON REACCIÓN QUÍMICA

Recomendaciones:

1. Los balances de materia se hacen por componente (**en moles**) que intervienen en la reacción química.
2. A la salida del reactor tiene que haber: menos número de moles de reactivos que a la entrada y más número de moles de producto que a la entrada.
3. Para calcular la cantidad de reactivos y de productos a la salida hay que tener en cuenta los siguientes **conceptos**:
 - * Inertes
 - * Reactivo limitante
 - * Grado de conversión / Rendimiento del proceso
 - * Puntos de mezcla y puntos de derivación (ver seminario 2)

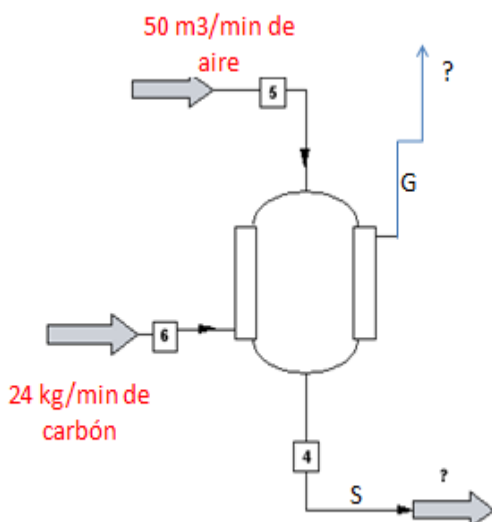
Balance en estado estacionario (A=0) **E + T = S**

• BM global	kg	→	T = 0
	mol	→	T = f(estequiometria) No Recomendable
• BM componente	kg	→	No Recomendable
	mol	→	Producto (T > 0); Reactivo (T < 0); Inerte (T = 0)
• BM especies atómicas	(at)	→	E = S

EJEMPLOS DE BALANCE DE MATERIA CON REACCIÓN QUÍMICA

EJEMPLO 1. SISTEMA SIMPLE:

A un reactor químico entran 24 kg/min de carbono y 50 m³/min de aire medidos a 10 atm y 300 K. En el reactor tiene lugar la combustión del carbono según el proceso: **C + O₂ → CO₂**, con un rendimiento del 80%. Calcula el flujo másico de salida de carbón que sale por la corriente S y la composición de los gases de salida.



Solución:

Entrada (corriente 5):

Aire (en moles)
 $p \cdot V = nRT$

$$n = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{10 \text{ atm} \cdot 50000 \text{ l}}{0.082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \cdot 300 \text{ K}} = 20325.2 \text{ moles/min}$$

Moles de **O₂** = 0.21 · n_{aire} = **4268.3 moles/min**

Moles de **N₂** = 0.79 · n_{aire} = **16056.9 moles/min**

Entrada (corriente 6):

Carbón (en moles)

$$n = \frac{m(g)}{P. \text{ molec } (\frac{g}{mol})} = \frac{24000}{12} = 2000 \text{ moles/min}$$

Reacción química: $C + O_2 \rightarrow CO_2$

¿Reactivo limitante? $\rightarrow C$

Nº de moles de C que reacciona: $0.8 \cdot 2000 = 1600$ moles

Nº de moles de O_2 que reacciona: 1600 moles

Nº de moles de N_2 que reacciona: 0 (es **inerte**)

Nº de moles de CO_2 que se forman: 1600 moles

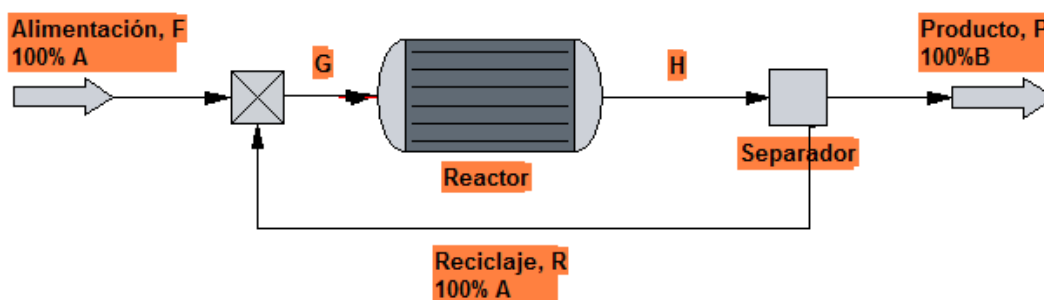
Tabla Resumen:

	ENTRADA (moles/min)		SALIDA (moles/min)	
	AIRE	CARBÓN (S)	CARBÓN (S)	G
C		2000	400	
O_2	4268.3			2668.3
N_2	16056.9			16056.9
CO_2	-			1600
				Total G: 20325,2

Composición de la corriente G (% molar = % volumen): 13.13% de oxígeno, 79% de nitrógeno y 7.87% de dióxido de carbono

EJEMPLO 2: SISTEMAS CON RECIRCULACIÓN Y/O PURGA

Mediante un proceso como el que se muestra en la figura, una sustancia A se convierte en B. Sabiendo que la conversión por paso es del 30%, calcular la cantidad de A que se recircula en el proceso en función de F (relación F/R).



Solución:

Se toma **Base de Cálculo en G** (entrada reactor): 100 moles (todo es A porque F y R son 100%A)

► **BM en reactor:**

Reacción: $A \rightarrow B$

Tabla:

	Entrada	Reacciona	Salida
A	100	30	70
B	-	-	30
			Total salida: 100

Composición a la salida del reactor: 70% A y 30%B

► **BM Separador:**

Global: $H = P + R$

Parcial (Componente A): $100 \cdot 0.7 = P \cdot 0 + R \cdot 1 \rightarrow R = 70$ moles A

► **BM en punto de mezcla:** Si R= 70 moles A y G 100 moles de A $\rightarrow F + R = G$

$F + 70 = 100 \rightarrow F = 30$ moles de A

Solución: se recirculan 70 moles de A (R) por cada 30 moles de A que se alimentan (F)

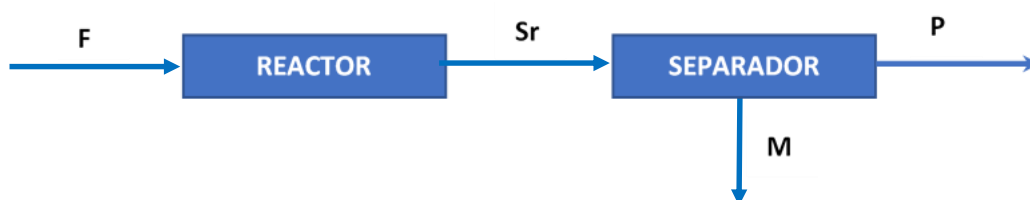
Relación **F/R= 30/70**

EJERCICIOS PROPUESTOS

1. Se utiliza un reactor catalítico para producir formaldehído a partir de metanol por medio de la reacción: $\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{HCHO} + \text{H}_2$

En el reactor se alcanza un rendimiento del 70%, así que la corriente de salida del reactor se pasa a un separador del formaldehído del metanol, donde se separan totalmente estas dos sustancias, obteniéndose dos corrientes: una que contiene al formaldehído (corriente P) y otra al metanol (corriente M). La cantidad de hidrógeno que se alcanza en la corriente de producto (P) es del 5% molar.

- Indique qué sustancias de las que intervienen en el proceso hay en cada una de las corrientes F, Sr, P y M
- Calcule, por cada mol/min de metanol alimentado al reactor, la velocidad de producción de formaldehído en moles y la composición (%molar) de la corriente M.



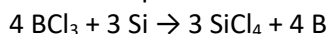
Sol.: 0,7 mol/min de HCHO; composición CH_3OH 31,25%, H_2 68,75%

2. Para la producción de amoníaco, se emplea como alimentación fresca una corriente gaseosa de nitrógeno e hidrógeno en una proporción molar 1:3. El grado de conversión en el reactor es del 30%. El amoníaco formado se separa totalmente por condensación y los gases que resultan se recirculan tal y como se muestra en el esquema siguiente. Determinar la relación de recirculación (moles recirculados/moles alimentación fresca).

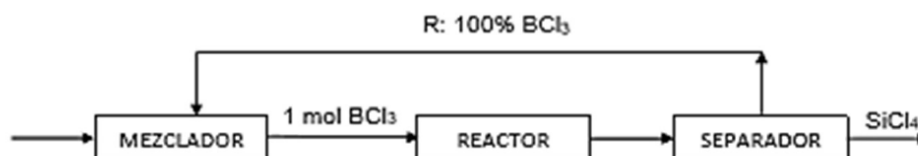


Sol.: Relación R/F= 2,33

3. A partir de los datos que se muestran en el esquema, calcular la razón molar entre la corriente de recirculación y el SiCl_4 que abandona el separador. La reacción que tiene lugar es:

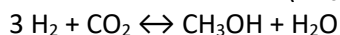


La conversión es del 87% en el reactor y la alimentación al mismo es estequiométrica.



Sol.: Razón 0,2

4. En el proceso de síntesis de metanol (CH_3OH) basado en la reacción:

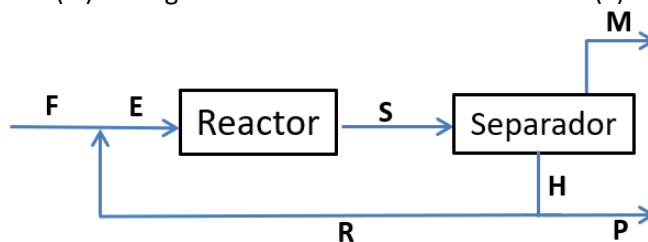


se emplea como alimentación (F) una mezcla estequiométrica de H_2 y CO_2 , en la que también hay presente un gas inerte (Argón).

En el reactor se logra una conversión del 60%, pero para ello la concentración de inertes que entra al reactor debe mantenerse por debajo del 2% molar. Para conseguir esto último, a la salida del reactor se coloca un separador que consigue separar completamente los productos (CH_3OH y H_2O) por la corriente M de los reactivos no reaccionados (H_2 , CO_2 y Ar) por la corriente H. De esta última corriente (H) se purga un 10% (P) y el resto se recircula (R). Si se toma como base de cálculo 1 mol/s de CO_2 a la entrada del reactor, calcular:

a) composición (%) de la corriente R y P

b) composición (%) en Argón en la corriente de alimentación (F)



Sol: a) R y P: CO_2 (23,8%); H_2 (71,3%); Ar (4,9%)

c) %Ar (F) = 0,3%