Sistemas con reacción química

En las reacciones químicas las sustancias se combinan para dar otras diferentes, y aunque la masa de total y la de cada elemento se conserva, las sustancias químicas son generadas (caso de los productos) o consumidas (caso de los reactivos) en las reacciones. Veamos un ejemplo:

Ecuación estequiométrica

$$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$$

sustancia — elemento

Los coeficientes estequiométricos me indican las proporciones MOLARES en que las sustancias reaccionan entre sí. Se obtienen al ajustar la reacción

Masa Total:

$$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$$

1 mol	**5 moles**	**3 mol**	**4 moles**
44 g	**160 g**	**132 g**	**72 g**

6 moles - 204 g **7 moles - 204 g**

Ecuación estequiométrica

$$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$$

Los elementos:

- Iniciales: 3 C, 8 H y 10 O
- Finales: 3 C, 8 H y 10 O

Las sustancias:

- Iniciales: Propano y oxígeno (los reactivos) se consumen
- Finales: Dióxido de carbono y agua (los productos) son generados.

Cuando se realizan balances a las sustancias es preciso tener en cuenta los términos de CONSUMO y GENERACIÓN

Balance de Materia en sistemas <u>CONTINUOS</u> con reacción química:

Aplicado a la MASA TOTAL

$$\begin{bmatrix}\text{ENTRADA DE}\\ \text{MATERIA}\\ \text{TOTAL}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{SALIDA DE}\\ \text{MATERIA}\\ \text{TOTAL}\end{bmatrix}$$

Aplicado a un **<u>ELEMENTO</u>** QUÍMICO

$$\begin{bmatrix}\text{ENTRADA DEL}\\ \text{ELEMENTO "A"}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{SALIDA DEL}\\ \text{ELEMENTO "A"}\end{bmatrix}$$

Aplicado a una **<u>SUSTANCIA</u>** QUÍMICA

$$\begin{bmatrix}\text{ENTRADA DE}\\ \text{LA SUSTANCIA "A"}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\text{GENERACIÓN NETA}\\ \text{DE LA SUSTANCIA "A"}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{SALIDA DE}\\ \text{LA SUSTANCIA "A"}\end{bmatrix}$$

Balances en Sistemas con reacción química

- **El número de BMI será igual al de reacciones químicas independientes, que llamaremos q, más uno.**

Nº BMI = q +1

- **Para su resolución emplearemos una <u>tabla estequiométrica</u>, que nos permitirá relacionar las cantidades que reaccionan.**
- **Para usar esta tabla es preciso que la reacción esté ajustada.**

Ejemplo: Ajustar la siguiente reacción

$$C_4H_{10} + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$$

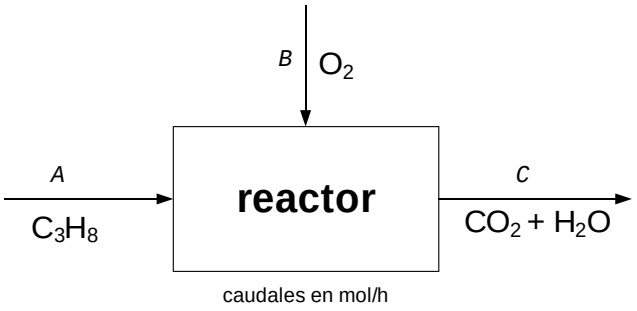
$$C_4H_{10} + \frac{13}{2}O_2 \rightarrow 4CO_2 + 5H_2O$$

$$2C_4H_{10} + 13O_2 \rightarrow 8CO_2 + 10H_2O$$

Ejemplo I - Balances en Sistemas con reacción química

EJEMPLO: combustión de un hidrocarburo con oxígeno como comburente. Se usa la <u>cantidad estequiométrica</u> de oxígeno. La <u>reacción</u> es <u>completa</u> e instantánea.

$$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$$



	Entrada (mol/h)	Consumo (-) Generación(+)	Salida (mol/h)
C_3H_8	**100**	**-100**	**0**
O_2	**500**	**-500**	**0**
CO_2	**0**	**+300**	**300**
H_2O	**0**	**+400**	**400**
Total	**600**	**-**	**700**

Base de cálculo A=100 moles/h

A partir de la Tabla anterior es posible escribir las siguientes ecuaciones:

A = 100 mol/h

B = 500 mol/h

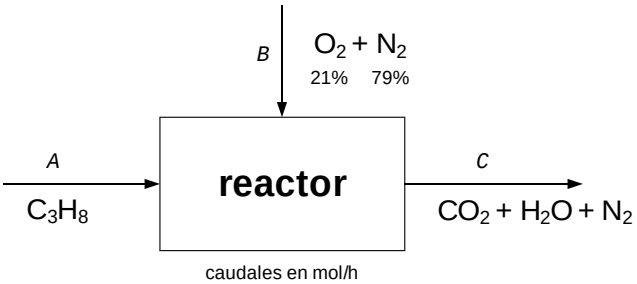
C = 700 mol/h

$$X^C_{CO_2} = \frac{300 \text{ mol/h}}{700 \text{ mol/h}} = 0.43 \qquad X^C_{H_2O} = \frac{400 \text{ mol/h}}{700 \text{ mol/h}} = 0.57$$

Ejemplo II - Balances en Sistemas con reacción química

EJEMPLO: combustión de un hidrocarburo con aire como comburente. Se usa la <u>cantidad estequiométrica</u> de <u>aire</u>. La <u>reacción</u> es <u>completa</u> e instantánea.

$$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$$



	Entrada (mol/h)	Consumo (-) Generación(+)	Salida (mol/h)
C_3H_8	**100**	**-100**	**0**
O_2	**500**	**-500**	**0**
N_2	**1881**	**0**	**1881**
CO_2	**0**	**+300**	**300**
H_2O	**0**	**+400**	**400**
Total	**2481**	**-**	**2581**

Base de cálculo A=100 moles/h

A partir de la Tabla anterior es posible escribir las siguientes ecuaciones:

A = 100 mol/h

B = 500 +1881 = 2381 mol/h

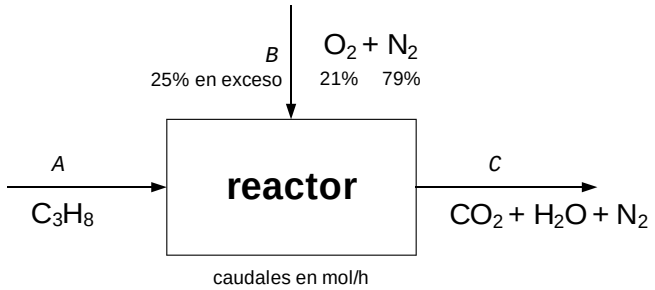
C = 2581 mol/h

$$X^C_{H_2O} = 0.15; \quad X^C_{N_2} = 0.73; \quad X^C_{CO_2} = 0.12;$$

Ejemplo III - Balances en Sistemas con reacción química

EJEMPLO: combustión de un hidrocarburo con aire como comburente. Se usa un 25% de exceso sobre la <u>cantidad estequiométrica</u> de <u>aire</u>. La <u>reacción</u> es <u>completa</u> e instantánea.

$$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$$



	Entrada (mol/h)	Consumo (-) Generación(+)	Salida (mol/h)
C_3H_8	**100**	**-100**	**0**
O_2	**1.25 * 500**	**-500**	**0.25 * 500**
N_2	**2351**	**0**	**2351**
CO_2	**0**	**+300**	**300**
H_2O	**0**	**+400**	**400**
Total	**3076**	**-**	**3176**

Base de cálculo A=100 moles/h

A partir de la Tabla anterior es posible escribir las siguientes ecuaciones:

A = 100 mol/h
B = 2976 mol/h
C = 3176 mol/h

$X^C_{O_2} = 0.039$; $X^C_{N_2} = 0.740$; $X^C_{CO_2} = 0.094$; $X^C_{H_2O} = 0.126$;

Concepto de Reactivo Limitante

$$\mathbf{aA + bB \rightarrow cC + dD}$$

a, b, c y d son los **<u>coeficientes estequiométricos</u>**

Cociente estequiométrico de dos sustancias:

Es la razón (división) entre los coeficientes estequiométricos de dichas sustancias. P. ej.: el cociente estequiométrico de A respecto a B es a/b. ES EL COCIENTE ENTRE LAS CANTIDADES **<u>ESTEQUIOMÉTRICAS.</u>**

Cociente molar de dos sustancias:

Es la razón (división) entre las cantidades molares (es decir, expresadas en moles) de dichas sustancias, es decir, ES EL COCIENTE ENTRE LAS CANTIDADES **<u>QUE HAY</u>** EN EL SISTEMA ANTES DE LA REACCIÓN.

Reactivo limitante:

Es el reactivo que se acabaría primero, si dejamos transcurrir completamente la reacción. Los otros reactivos sobrarían (por eso se les llama reactivos en exceso). Por tanto el reactivo limitante "LIMITA" el progreso de la reacción, y de ahí su nombre.

¿Cómo se reconoce al reactivo limitante?

Una vez que se dispone de la ecuación estequiométrica ajustada de la reacción y se conocen las cantidades molares de los reactivos, es sencillo identificar al reactivo limitante. Veamos un ejemplo.

$$CH_4 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$$

Ajuste

$$CH_4 + 2\ O_2 \rightarrow CO_2 + 2\ H_2O$$

Si partimos de un mol de O_2 y un mol de CH_4, ¿Cuál es el reactivo limitante?

- Como 1 mol de CH_4 reacciona con 2 de O_2, para que reaccione todo el CH_4 se necesitarían 2 moles de O_2 y sólo tenemos 1 mol de O_2, por lo tanto no puede reaccionar todo el CH_4 (sobraría) y se acabaría el O_2. Por ello el O_2 es el reactivo limitante.

Conversión:

Cuando la reacción no se completa

En la mayoría de las ocasiones el reactivo limitante no reacciona completamente, ya sea porque se trata de una reacción reversible o bien porque la cinética de la reacción es lenta y no llega a completarse o incluso por ambas cosas.

CONVERSIÓN (x)

(SE APLICA AL REACTIVO LIMITANTE)

$$x = \frac{\text{moles del reactivo limitante que reaccionan}}{\text{moles iniciales (entrada) del reactivo limitante}}$$

Exceso de etileno (el oxígeno es el limitante), <u>reacción completa</u>

$$CH_2 = CH_2 + 1/2\ O_2 \rightarrow C_2H_4O$$

0.5 O_2

$CH_2=CH_2$ **3** — **Reactor** — C_2H_4O, $CH_2=CH_2$

	Entrada	Reacción	Salida
$CH_2=CH_2$	3	- 1	2
O_2	0.5	-0.5	0
C_2H_4O	0	1	1

$$x = \boxed{\frac{0.5}{0.5}} = 1$$

OXÍGENO

Exceso de etileno (el oxígeno es el limitante), <u>reacción incompleta</u>

$$CH_2 = CH_2 + 1/2\ O_2 \rightarrow C_2H_4O$$

2 O_2

$CH_2=CH_2$ **5** — **Reactor** — C_2H_4O, $CH_2=CH_2$, O_2 **0.5**

	Entrada	Reacción	Salida
O_2	2	-1.5	0.5
$CH_2=CH_2$	5	-3	2
C_2H_4O	0	3	3

$$x = \boxed{\frac{1.5}{2.0}} = 0.75$$

OXÍGENO