

Investigación y desarrollo de material bibliográfico para los balances de materia con varias unidades de proceso con reacciones químicas, sistemas monofásicos y multifásicos.

Molina Chorlango, Vanesa Mishel

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Trabajo de Unidad de Integración Curricular, previo a la obtención del título de

Petroquímico

Ing. Luna Ortiz, Eduardo David

27 de agosto del 2021

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

CERTIFICACIÓN

Certifico que el Trabajo de Unidad de Integración Curricular, **“Investigación y desarrollo de material bibliográfico para los balances de materia con varias unidades de proceso con reacciones químicas; sistemas monofásicos y multifásicos.”** fue realizado por la señorita **Molina Chorlango, Vanesa Mishel** el cual ha sido revisado y analizado en su totalidad por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto cumple con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, 27 de agosto del 2021



Firmado electrónicamente por:
**EDUARDO
DAVID LUNA**

.....
Ing. Luna Ortiz, Eduardo David

C.C.: 1802724912

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

REPORTE DE VERIFICACIÓN



Document Information

Analyzed document	Molina Chorlango Vanesa Misha_Integración Curricular_MIC.pdf (D111762891)
Submitted	8/27/2021 9:35:00 PM
Submitted by	Lorena Ibarra
Submitter email	loretaibarra@yahoo.es
Similarity	4%
Analysis address	lorenadibarra.uta@analysis.arkund.com



Ing. Luna Ortiz, Eduardo David

C.C.: 1802724912

Sources included in the report

W	URL: https://hdquimicaeiqtotah.files.wordpress.com/2018/10/libro-de-balance-felder.pdf Fetched: 11/5/2019 6:22:05 PM	 6
W	URL: https://pdfcookie.com/documents/principios-elementales-de-los-procesos-quimicos-felder-52e1d009ydv8 Fetched: 5/18/2021 5:42:31 AM	 2
W	URL: https://www.docsity.com/es/termodinamica-cengel-6ta-edicion/7531191/ Fetched: 6/20/2021 8:41:04 PM	 1

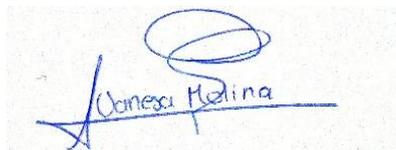
DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

RESPONSABILIDAD DE AUTORÍA

Yo, **Molina Chorlango, Vanesa Mishel**, con cédula de ciudadanía n° 1724575343, declaro que el contenido, ideas y criterios del Trabajo de Unidad de Integración Curricular: **Investigación y desarrollo de material bibliográfico para los balances de materia con varias unidades de proceso con reacciones químicas; sistemas monofásicos y multifásicos** es de mi autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos, y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Latacunga, 27 de agosto del 2021



Molina Chorlango, Vanesa Mishel

C.C.: 1724575343

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE PETROQUÍMICA

AUTORIZACIÓN DE PUBLICACIÓN

Yo, **Molina Chorlango, Vanesa Mishel**, con cédula de ciudadanía n° 1724575343, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el Trabajo de Unidad de Integración Curricular: **Investigación y desarrollo de material bibliográfico para los balances de materia con varias unidades de proceso con reacciones químicas; sistemas monofásicos y multifásicos**, en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de mi responsabilidad.

Latacunga, 27 de agosto del 2021



Molina Chorlango, Vanesa Mishel

C.C.: 1724575343

DEDICATORIA

Este Trabajo de Unidad de Integración Curricular está dedicado a mis padres Rosa y Lorenzo, quienes con su trabajo y esfuerzo me han brindado todo el apoyo, amor y comprensión necesaria para alcanzar esta meta académica.

A mi hermano Alex, mis tíos y primos quienes no me han dejado decaer, y han sido un impulso para seguir adelante.

A mis abuelos Carmen y Francisco, quienes siempre han estado pendientes de cada momento en mi vida.

A mis compañeros y amigos, que de manera desinteresada me han compartido su conocimiento y han sido parte de mis experiencias.

AGRADECIMIENTO

Agradezco infinitamente a mis padres, por la confianza, el apoyo económico y emocional que han sido los pilares fundamentales para la culminación de esta etapa, por cada consejo brindado día tras día que me ha ayudado a formarme como hija, hermana y persona.

Agradezco a todos los buenos docentes que lograron compartir sus conocimientos, consejos y valores con justicia y equidad. Muchas gracias Ing. Caterine Donoso, Ing. Ernesto Santillán.

Además quiero agradecer al Ing. David Luna por el apoyo y confianza depositada, para el desarrollo de este trabajo.

Agradezco a mi maestro de Taekwondo, Lic. Mauricio Valladares que pesar de la distancia siempre estuvo presente, quién me enseñó que una derrota no es el final, solo la motivación para levantarse y que el deporte y la educación siempre van de la mano.

A mis amigos más cercanos Mari, Teddy, Brayan, Lili, Jorge, Diego y Sebas quienes fueron parte de mi desarrollo y la cosecha de experiencias muy placenteras. Finalmente agradezco a las personas que se convirtieron en mi segunda familia durante toda esta etapa académica, gracias Mari, Jessi, Betzy y Belencita.

Tabla de contenidos

Carátula.....	1
Certificación.....	2
Reporte de verificación.....	3
Responsabilidad de autoría.....	4
Autorización de publicación.....	5
Dedicatoria.....	6
Agradecimiento.....	7
Resumen.....	9
Abstract.....	10
Generalidades.....	11
Antecedentes.....	11
Planteamiento Del Problema.....	12
Justificación E Importancia.....	12
Objetivos.....	13
<i>Objetivo General</i>.....	13
<i>Objetivos Específicos</i>.....	13
Capítulo ii.....	14
Conclusiones y recomendaciones.....	15
Conclusiones.....	15
Recomendaciones.....	16
Bibliografía.....	17
Anexos.....	19

RESUMEN

El presente trabajo se desarrolló mediante la recopilación y generación de información bibliográfica referente balances de materia, el primer capítulo trata el estudio de procesos químicos que abarcan múltiples unidades de proceso, que incluyen reacciones de conversión, purgas y recirculación, además menciona la descripción de los diagramas de flujo, el análisis de grados de libertad considerando las operaciones reactivas dentro de un sistema de unidades múltiples de procesos, y aplica el conocimiento en la resolución de problemas de ingeniería química, petroquímica y afines. El capítulo dos analiza las propiedades físicas de un material relacionado al balance de materia en un sistema monofásico considerándolo como una condición de uniformidad de todos los componentes de un proceso, donde cada componente tiene propiedades físicas y químicas independientes entre sí, y estudia que la variación de la temperatura y presión modifica a las propiedades de las sustancias sólida y líquidas. Finalmente el tercer capítulo estudia a sistemas que implican múltiples unidades de proceso y utilizan sistemas multifásicos que presentan mezclas simultáneas entre varias fases (sólido, líquido y gas), e incluye operaciones de balance de materia que implican cambios de fase como: destilaciones, congelaciones, condensación, evaporación, etc.

Palabras clave

- **BALANCE DE MATERIA**
- **MÚLTIPLES UNIDADES**
- **MONOFÁSICOS**
- **MULTIFÁSICOS**

ABSTRACT

This work was developed through the compilation and generation of bibliographic information related to material balances, the first chapter deals with the study of chemical processes involving multiple process units, including conversion reactions, purges and recirculation, also mentions the description of flow diagrams, the analysis of degrees of freedom considering the reactive operations within a system of multiple process units, and applies the knowledge in solving problems of chemical, petrochemical and related engineering. Chapter two analyzes the physical properties of a material related to the balance of material in a single-phase system considering it as a condition of uniformity of all the components of a process, where each component has physical and chemical properties independent of each other, and studies that the variation of temperature and pressure modifies the properties of solid and liquid substances. Finally, the third chapter studies systems that involve multiple process units and use multiphase systems that present simultaneous mixtures between several phases (solid, liquid and gas), and includes material balance operations that involve phase changes such as: distillations, freezing, condensation, evaporation, etc.

Keywords

BALANCE OF MATERIAL

MULTIPLE UNITS

SINGLE-PHASE

MULTIPHASE

CAPÍTULO I

1. Generalidades

1.1. Antecedentes

La industria petroquímica se enfoca en la producción de materias primas, productos intermedios y productos finales con alto valor agregado, la magnitud del mercado petroquímico enfocado en la producción mundial de poliolefinas por sí sola es de más de 80 mil millones de toneladas por año y se espera que crezca a una tasa del 4% al 5% anual. Tal crecimiento requiere que se invierta mucho trabajo para mejorar las técnicas en los procesos y de esta forma mejorar la calidad de los productos. (Matar & Hatch, 1995).

Cuando se solicita determinar el valor de flujo, composición, etc., de una corriente es fundamental organizar la información proporcionada para el desarrollo de cálculos subsecuentes con ayuda de un diagrama de flujo. Los procesos químicos industriales no suelen incluir una sola unidad de proceso, a menudo se presentan sistemas compuestos por uno o más reactores químicos, y también unidades para mezclar reactivos, combinar productos, calentar y enfriar corrientes de proceso, separar a los productos de los reactivos sin consumir, eliminar corrientes contaminantes, etc. (Felder & Rousseau, 2004).

Si el sistema contiene una corriente de reciclaje, es necesario utilizar dos definiciones de conversión de reactivos en el análisis de reactores químicos: la conversión general, que parece ignorar el hecho de que se está produciendo el reciclaje y se calcula puramente sobre la base de la diferencia entre las entradas y las salidas del proceso general y la conversión de un solo paso que se basa en la diferencia entre la entrada y la salida del reactor, dentro del circuito de reciclaje. (Ghasem & Henda, 2014).

La mayoría de los problemas de balance de materia podrían resolverse mediante la información proporcionada, pero esto no siempre es tan conveniente, y por lo general es necesario determinar algunas propiedades físicas del compuesto como la densidad, la gravedad y volumen específico de soluciones, etc., considerando un sistema monofásico líquido o gas con comportamiento ideal o real. (Felder & Rousseau, 2004). Por otro lado, Murphy, (2007) menciona que en procesos de separación, las mezclas de múltiples componentes se separan en corrientes de diferente fase y composición. Estos procesos multifásicos pueden explicarse mediante el análisis de la concentración de un componente de una fase y la

concentración del mismo componente en otra fase distinta. Algunas operaciones unitarias de separación en fases, como la destilación que se basa en la producción de vapor mediante la ebullición de una mezcla líquida que busca separarse en sus componentes y la condensación del vapor producido. (McCabe, et. al, 2007).

1.2.Planteamiento del problema

La recopilación y generación de nuevas fuentes de información bibliográfica, que traten temas de balance de materia en procesos químicos y petroquímicos es necesario debido a la escasez de fuentes informativas que se enfoquen y agrupen procesos relacionados a la industria química, petroquímica y afines. Esta problemática aumenta cuando se trata de procesos de balances de materia específicamente de la industria petroquímica, debido a que regularmente es complicado obtener con facilidad información específica, generando que los interesados en el tema deban aprender el desarrollo de procesos enfocados solamente a la química, dejando de lado la idea inicial de interés y generando conflictos en la comprensión, reconocimientos de procesos y condiciones de operación de la industria petroquímica.

1.3.Justificación e importancia

La recopilación y generación de información bibliográfica de los balances de materia destinada principalmente a exponer problemas que surgen en relación con los procesos petroquímicos, químicos y sus afines, está destinado principalmente a exponer conceptos, métodos y consideraciones que permiten comprender el funcionamiento de procesos de la industria donde se usen balances de flujos de materia, específicamente en relación a sistemas que constan de dos o más unidades de proceso y que implican reacciones químicas además de la presencia o no de ecuaciones químicas que rigen sistemas monofásicos y multifásicos.

Mediante la aplicación acertada de los balances de materia es posible determinar las corrientes másicas que se generan en un determinado proceso. Se consideran los grados de libertad para los sistemas conformados por múltiples unidades, con el fin de establecer si el sistema es posible de realizar acorde con el análisis de grados de libertad en función de la respectiva estructura de diagrama de flujo. Para la introducción de cálculos en los procesos químicos monofásicos y aquellos que implican cambios en la fase de un material (multifásicos), es necesario el uso de la ecuación de gases ideales y relaciones de gases reales.

El fin de compilar y generar material bibliográfico, es el de utilizar esta información para elaborar un capítulo de balance de materia que abarquen sistemas químicos y petroquímicos con reacciones en procesos monofásicos y multifásicos, que posteriormente será utilizado para la elaboración de un libro alternativo de aprendizaje de los principios básicos y las técnicas de cálculo utilizadas, relacionadas a la química y petroquímica.

1.4.Objetivos

1.4.1. *Objetivo General*

Establecer información bibliográfica referente a los balances de materia de varias unidades de proceso con reacciones químicas en sistemas monofásicos y multifásicos.

1.4.2. *Objetivos específicos*

- Investigar información bibliográfica sobre los balances de materia con varias unidades de proceso, y reacciones químicas en sistemas monofásicos y multifásicos.
- Describir los sistemas monofásicos relacionados en procesos químicos, petroquímicos y afines.
- Describir los sistemas multifásicos relacionados en procesos químicos, petroquímicos y afines.
- Elaborar material bibliográfico referente a los balances de materia de varias unidades de proceso con reacciones químicas; y con sistemas monofásicos y multifásicos.

CAPÍTULO II

El producto acreditable a presentar es el material bibliográfico compilado sobre los balances de materia con varias unidades de proceso con reacciones químicas; sistemas monofásicos y multifásicos utilizadas en procesos químicos, para ser utilizado en la elaboración de un capítulo de un libro de balance de materia y energía se encuentra detallado en el anexo 1.

CAPÍTULO III

Conclusiones y recomendaciones

3.1. Conclusiones

- Una vez culminado el proceso de obtención de información en diversas fuentes bibliográficas, es posible concluir que la mayoría de sistemas químicos y petroquímicos están formados por corrientes de recirculación, que cumplen el propósito de reusar componentes parcialmente consumidos en el reactor, para de esta manera generar una mejora en la eficiencia del proceso.
- La comprensión de la metodología relacionada con el balance de materia en sistemas reactivos con múltiples unidades de proceso, permite concluir que un proceso puede reducir su rendimiento debido a la falta de corrientes que purgen el sistema, evitando la acumulación indeseable de compuestos en el reactor.
- Al desarrollar el segundo capítulo del presente proyecto de recopilación bibliográfica, se puede concluir que el comportamiento de un gas ideal en comparación con un gas real, no son iguales, esto se debe a la interacción intermolecular que presenta cada gas mencionado anteriormente, no obstante todos los gases suelen ser considerados como ideales debido a la facilidad de análisis que se consigue en varios procesos.
- Por medio de la búsqueda de información para el desarrollo de este proyecto es posible concluir que el comportamiento de un componente, puede modificarse dependiendo de las condiciones a las que se opere el sistema; es así que las composiciones entre las fases líquido y vapor de una mezcla se ven afectadas directamente por la temperatura, mientras que en una mezcla de fases líquido-líquido la temperatura afectará directamente a la solubilidad de cada componente.
- Luego de investigar el funcionamiento de un diagrama de fases de un compuesto puro, se puede concluir que dicho diagrama facilitará la comprensión de la influencia que tienen la temperatura y la presión en el comportamiento de esta sustancia en relación a los cambios de fase que puede experimentar; llegando a presentarse condiciones en las que dos fases de un mismo compuesto están coexistiendo en equilibrio o simplemente una fase es la predominante.

- Mediante el desarrollo de este proyecto se concluye que la elaboración de material bibliográfico, que detalle conceptos y resolución de problemas en procesos químicos y petroquímicos tendrá un aporte significativo para aquellas personas interesadas en el estudio de la ingeniería química, petroquímica o afines.

3.2. Recomendaciones

- Es recomendable que la información recopilada en este proyecto sea actualizada gradualmente de acuerdo con el avance de nuevos procesos y/o tecnologías usadas en la industria química y petroquímica.
- La industria petroquímica se basa en la transformación de compuestos derivados del petróleo en productos químicos que con regularidad emplean catalizadores que mejoran el rendimiento o tiempo de operación del proceso, ante este preámbulo se recomienda profundizar en la influencia que tienen los principales catalizadores empleados en esta industria en los balances de materia con sistemas reactivos.
- El desarrollo de este proyecto se enfoca en la conceptualización y desarrollo de balances de materia en sistemas de procesos químicos, petroquímicos y afines, así como también en el análisis de sistemas monofásicos y multifásicos, sin embargo, se recomienda considerar el uso de simuladores que permitan elevar la calidad de información de este proyecto investigativo e inclusive elaborar una comparación de los resultados presentados por el simulador.
- En relación a futuras modificaciones del presente trabajo, se recomienda incluir fuentes bibliográficas que abarquen a la rama de biorefinería y la química verde, permitiendo ampliar y combinar procesos referentes a la química, petroquímica, biorefinería y química verde.

Bibliografía

- Ashrafizadeh, S. A., & Tan, Z. (2018). *Mass and Energy Balances: Basic Principles for Calculation, Design, and Optimization of Macro/Nano Systems*. <http://www.springer.com/series/1161>
- Chaudhuri, U. R. (2016). *Fundamentals of Petroleum and Petrochemical Engineering*. <https://doi.org/10.1201/b10486>
- Delgado Linares, J. G., Delgado Linares, G. A., & Mercado Ojeda, R. A. (2009). Balances de masa y energía simplificados, aplicados a un proceso de craqueo catalítico de petróleo. *Educación Química*, 20 (4), 456–460. [https://doi.org/10.1016/s0187-893x\(18\)30050-8](https://doi.org/10.1016/s0187-893x(18)30050-8)
- Felder, R., & Rousseau, R. (2004). *Principios elementales de los procesos químicos*. (3ra ed.). Limusa Wiley.
- Foust A., Wenzel L., Clump C., Maus, L., Bryce, L. A., (1987). *Principios de operaciones Unitarias*. Compañía editorial continental.
- Ghasem, N., & Henda, R. (2014). *Principles of chemical engineering processes: Material and energy balances*. CRC Press. <https://doi.org/10.1201/b17696>
- Gooding Gavarito, N. (2009). *Balance de materia: Para ingenieros químicos* (Séptima). UNAL.
- Himmelblau David. (1997). *Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química* (6ta ed.). University of Texas.
- Hougen O. A., Watson K. M. y Ragatz R. A., *Chemical Process Principles* (2° ed.) John Wiley & Sons.
- Izquierdo J. , Costa J., Martínez de la Ossa E., Rodríguez J., M. I. (2011). *Introducción a la Ingeniería Química: Problemas resueltos de balances de materia y energía*. Editorial Reverté.
- Matar, S., & Hatch, L. (1995). *Chemistry of petrochemical processes* (2da ed., Issue 345). McGraw-Hill
- McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriot, P. (2007). *Operaciones unitarias en ingeniería química*. (7ma ed.). McGraw-Hill.
- Monsalvo, R., Miranda, Ma. G., Romero, Ma. del R., Muñoz, G.(2014). *Balance de materia y energía: Procesos industriales*. Grupo editorial Patria

- Murphy, R. M. (2007). *Introducción a los procesos químicos: principios, análisis y síntesis*. (2da ed.). McGraw-Hill.
- Reid R. C., Prausnitz J. M., y Poling B. E., *The Properties of Gases and liquids*, (4a. ed.). McGraw-Hill.
- Reklaitis, G. V. (1986). *Balances de materia y energía*. John Wiley & Sons.
- Sullivan, D., Metro, S., & Pujadó, P. R. (2015). Isomerization in Petroleum Processing. In *Handbook of Petroleum Processing*. https://doi.org/10.1007/978-3-319-14529-7_7
- Torres Robles, R., & Castro Arellano, J. J. (2002). *Análisis y simulación de procesos de refinación del petróleo*. <http://site.ebrary.com/id/10365911>
- Turton Richard, Bailie Richard, Whiting Wallace, S. J. (2009). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*.
- Veverka V. , F. M. (1997). *Material and Energy Balancing in the Process Industries: From Microscopic Balances to Large Plants* (L. M. Rose (ed.)). Elsevier Science B.V.

ANEXOS

Anexo 1

INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO DE MATERIAL BIBLIOGRÁFICO
PARA LOS BALANCES DE MATERIA CON VARIAS UNIDADES DE
PROCESO CON REACCIONES QUÍMICAS; SISTEMAS MONOFÁSICOS
Y MULTIFÁSICOS.

Índice de contenidos

Índice de contenidos	ii
Simbología.....	iv
Balances de Materia Aplicado a Unidades Múltiples de Procesos con Reacción Química.....	1
Objetivos de Aprendizaje	1
1.1 Diagramas de Flujo para Sistemas de Unidades Múltiples de Proceso	1
1.1.1 Diagramas de Flujo de Procesos con Recirculación	2
1.1.2 Diagramas de Flujo y Análisis de Procesos Reactivos con Recirculación y Purga.....	5
1.2 Análisis de Grados de Libertad (GDL) para Procesos Reactivos de Unidades Múltiples de Proceso.....	7
1.3 Procesos Reactivos en Estado Estacionario de Unidades Múltiples de Proceso.....	15
Ejercicios Propuestos.....	47
Referencias	56
Sistemas Monofásicos Aplicados a la Química y Petroquímica.....	57
Objetivos de Aprendizaje	57
2.1 Propiedades Físicas de una Sustancia.....	58
2.1.1 Densidades de Líquidos y Sólidos	58
2.2 Gases Ideales	61
2.2.1 Ecuación de Estado de Gases Ideales	61
2.2.2 Temperatura y Presión Estándar	64
2.2.3 Densidad de un Gas.....	67
2.3 Gases Reales.....	69
2.3.1 Temperaturas y Presiones Críticas.....	70
2.3.2 Ecuaciones de Estado para Gases No Ideales o Reales	70
2.3.2.1 Ecuación de Estado del Factor de Compresibilidad (z)	71

2.3.2.1.1 Gráficas de Compresibilidad.....	73
2.3.2.2 Ecuación Virial de Estado	79
2.3.2.3 Ecuación de estado Van Der Waals.....	81
2.3.2.4 Ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK).....	84
2.3.2.5 Mezcla de gases no ideales (La regla de Kay).....	86
Ejercicios Propuestos.....	90
Referencias	93
Balance de Materia Aplicados a la Química y Petroquímica para Sistemas Multifásicos.....	95
Objetivos de aprendizaje	95
3.1 Equilibrio de Fases de un Solo Componente.....	96
3.1.1 Diagrama de Fase.....	96
3.1.2 Curva de equilibrio vapor-líquido	99
3.1.3 Estimación de la presión de vapor	100
3.1.3.1 Ecuación Clapeyron.....	101
3.1.3.1.1 Ecuación Clausius-Clapeyron	101
3.1.3.3 Gráfico de Cox	104
3.1.3.4 Ecuación de Antoine.....	106
3.1.4 Estimación de la Presión Parcial	112
3.1.4.1 Ley de Dalton para Presiones Parciales.....	112
3.2 Regla de las Fases de Gibbs	114
3.3 Sistemas Gas-Líquido: un Componente Condensable.....	117
3.4 Sistema Multicomponente Gas-Líquido	124
3.4.1 Equilibrio vapor-líquido para soluciones ideales.	129
3.5 Solución Bifásica entre Líquidos	133
3.6 Solución Bifásica: Sólidos en Líquidos	133
Ejercicios Propuestos.....	141
Referencias	147
Apéndices.....	148

Simbología

m	Cantidad en peso.
\dot{m}	Flujo másico.
n	Cantidad en moles.
\dot{n}	Flujo molar.
GDL	Grados de libertad. (Abreviatura en castellano).
R	Constante de gases.
PM	Peso molecular.
V	Volumen de una unidad o de un fluido.
\dot{V}	Flujo volumétrico.
T	Temperatura.
x	Letra empleada para representar fracciones másicas o molares, y para representar el estado de una corriente de proceso en fase líquida.
y	Letra empleada para representar fracciones másicas o molares, y para representar el estado de una corriente de proceso en fase gaseosa.
Δ	Es el cambio de una variable en el proceso.
γ_i	Coefficiente estequiométrico de un componente i en una reacción química.
ξ	Avance de reacción, en una reacción química solo existe un valor de avance de reacción.
ρ	Densidad.
f	Conversión fraccional.
\hat{V}	Volumen específico.
\in	Error de estimación.

P_s	Presión estándar.
\widehat{V}_s	Volumen específico estándar.
SRK	Soave-Redlich-Kwong.
G_e	Gravedad específica.
z	Factor de compresibilidad.
T_s	Temperatura estándar.
T_c	Temperatura crítica.
P_c	Presión crítica.
z_c	Factor de compresibilidad crítica.
ω	Factor acéntrico de Pitzer.
P_r	Presión reducida.
T_r	Temperatura reducida.
V_r	Volumen reducido.
T'_c	Temperatura pseudocrítica.
P'_c	Presión pseudocrítica.
T'_r	Temperatura pseudorreducida.
P'_r	Presión pseudorreducida.
B, C, D	Coefficientes viriales.
B_0, B_1	Representan a los valores de aproximación de la ecuación virial.

a, b y α	Factores que permiten establecer la ecuación SRK.
V_m	Volumen molar. Es el volumen ocupado por una mol.
z_m	Factor de compresibilidad de una mezcla no ideal.
\hat{V}_g	Volumen molar específico del gas.
\hat{V}_l	Volumen molar específico del líquido.
\hat{H}_v	Calor latente de vaporización o entalpía de vaporización.
P_i^*	Presión de vapor de un componente i.
P_i	Presión parcial del componente i.
T_{pr}	Temperatura del punto de rocío.
P_{pr}	Presión del punto de rocío.

1

Balances de Materia Aplicado a Unidades Múltiples de Procesos con Reacción Química.

En los procesos químicos se realizan estudios en sistemas que abarcan múltiples unidades de proceso, que incluyen reacciones de conversión, purgas y recirculación, por lo que es necesario describir las características principales de los diagramas de flujo. Es recomendable aplicar el análisis de grados de libertad considerando las operaciones reactivas dentro de un sistema. Una vez comprendida la metodología que rige el sistema de unidades múltiples de procesos con operaciones reactivas, se utilizará este conocimiento para la resolución de problemas de ingeniería química, petroquímica y afines.

Objetivos de Aprendizaje

- Construir diagramas de flujo con unidades múltiples de proceso en sistemas reactivos que incluyan corrientes de reciclaje y purga.
- Elaborar un análisis de grados de libertad de unidades múltiples de proceso que presentan un sistema reactivo.
- Analizar y resolver problemas de balance de materia en sistemas de unidades múltiples que impliquen reacción/es, reciclaje y purga.

1.1 Diagramas de Flujo para Sistemas de Unidades Múltiples de Proceso

Se define a un diagrama de flujo como la representación gráfica de cualquier proceso químico, cuando este concepto es aplicado a procesos conformados por

unidades múltiples, un diagrama facilita la comprensión y el desarrollo de los problemas aplicados a la ingeniería química, petroquímica y afines.

1.1.1 Diagramas de Flujo de Procesos con Recirculación

Las corrientes de reciclo o recirculaciones se usan con el propósito de recuperar y reutilizar componentes que no se hayan consumido en su totalidad con el fin de mejorar la eficiencia del proceso. A continuación se presenta un diagrama sencillo de un sistema conformado por un reactor con recirculación, figura 1:

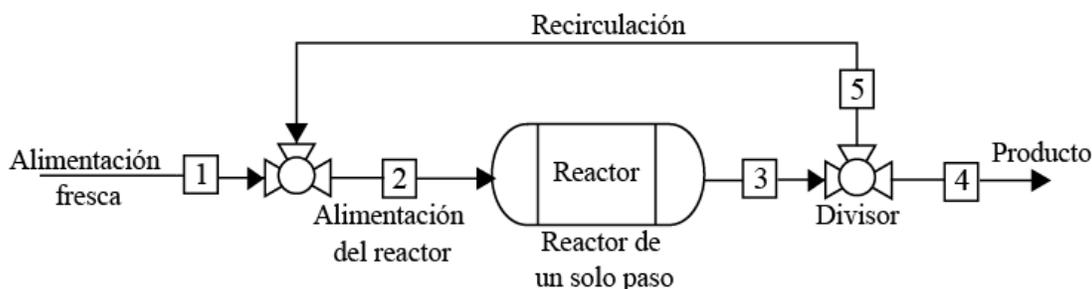


FIGURA 1.1

Diagrama de flujo con recirculación

En el caso de un sistema reactivo que presente corrientes de reciclo o recirculación, se considera la conversión dada por la razón de la diferencia entre la cantidad de reactivos de entrada (flujos de alimentación) y salida (flujos de productos), y la misma cantidad de reactivos en la entrada.

$$\text{Conversión general} = \frac{\text{Reactivos (e) sist.} - \text{Reactivos (s)sist.}}{\text{Reactivos (e) sist.}} \quad (1.1)$$

donde, (Reactivos (e) sist.) es la entrada de reactivos al sistema y (Reactivos (s)sist.) es la salida de reactivos del sistema.

Existen procesos donde la conversión se realiza en un solo paso y es determinado por la diferencia entre la entrada y salida del reactor y la entrada del reciclo:

$$\text{Conversión de un solo paso} = \frac{\text{Reactivos (e) react.} - \text{Reactivos (s)react.}}{\text{Reactivos (e) react.}} \quad (1.2)$$

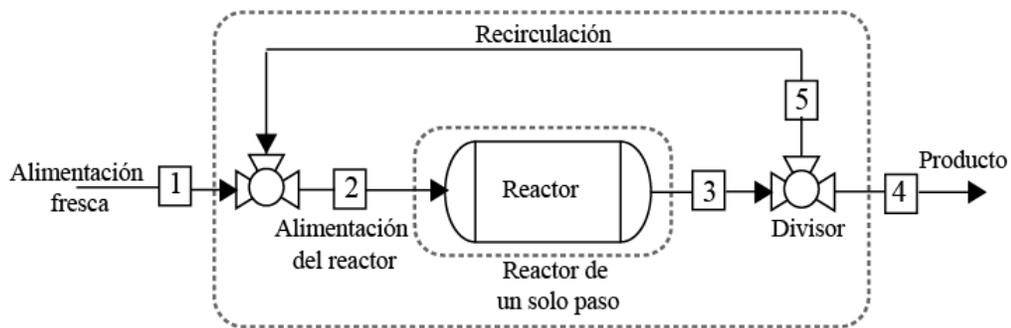
donde, (Reactivos (e) react.) es la entrada de reactivos al reactor y (Reactivos (s)react.) es la salida de reactivos del reactor.

Ejemplo 1.1 Conversión General y de un Solo Paso.

En un proceso de producción de amoníaco ingresan cantidades frescas de nitrógeno con impurezas e hidrógeno por la corriente 1, luego se mezclan con una corriente 5 de recirculación que contiene los mismos compuestos, esta mezcla ingresa como la corriente 2 a un reactor para formar cierta cantidad de amoníaco que sale por la corriente 3 junto con los reactivos que no reaccionaron, en un separador se retira todo el amoníaco por la corriente 4 y los compuestos que no reaccionaron son recirculados.

Encuentre una expresión para la conversión general y conversión en un solo paso del hidrógeno.

Solución



$$\text{Conversión general} = \left(\frac{\dot{m}_1 - \dot{m}_4}{\dot{m}_1} \right)$$

Expresión para la conversión en un solo paso del H_2

$$\text{Conversión de un solo paso} = \frac{\text{Reactivos (e) react.} - \text{Reactivos (s)react.}}{\text{Reactivos (e) react.}}$$

$$\text{Conversión de un solo paso} = \left(\frac{\dot{m}_2 \text{ H}_2 - \dot{m}_3 \text{ H}_2}{\dot{m}_2 \text{ H}_2} \right)$$

Expresión para la conversión en un solo paso del N_2

$$\text{Conversión de un solo paso} = \frac{\text{Reactivos (e) react.} - \text{Reactivos (s) react.}}{\text{Reactivos (e) react.}}$$

$$\text{Conversión de un solo paso} = \left(\frac{\dot{m}_2 \text{ N}_2 - \dot{m}_3 \text{ N}_2}{\dot{m}_2 \text{ N}_2} \right)$$

Al momento de estudiar los procesos petroquímicos, el análisis de diagramas de flujo se amplía, debido a que la industria del petróleo es considerada una de las más grandes. Por ejemplo, existen procesos de tratamiento de gas natural en donde se reducen los porcentajes de concentración de sulfuro de hidrógeno, dióxido de carbono y vapor de agua. El H_2S es eliminado por medio de un proceso de absorción física conocido como el proceso Selexol Figura 1.2, que no presenta una reacción química, sin embargo, existe recirculación de compuestos que no se han utilizado totalmente dentro del sistema.

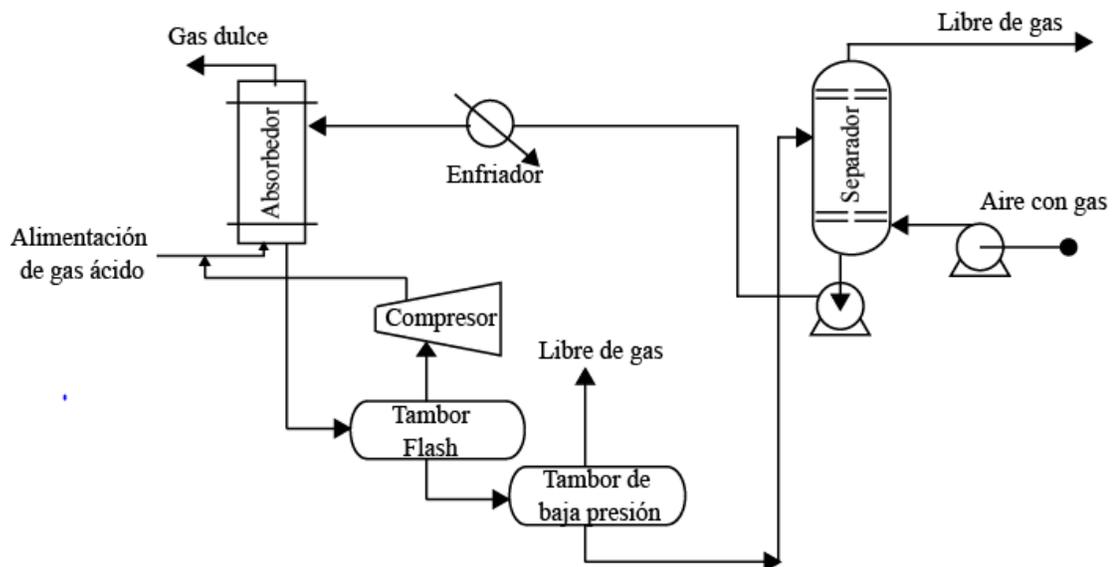


FIGURA 1.2

Diagrama de flujo del proceso Selexol

Existen procesos químicos que conllevan una o varias reacciones con recirculaciones, como es el caso del proceso Econamina Figura 1.3, que usa soluciones básicas de sodio que reaccionan con el compuesto de H_2S para formar carbonatos y sulfuros de sodio, como se muestra en el diagrama a continuación.

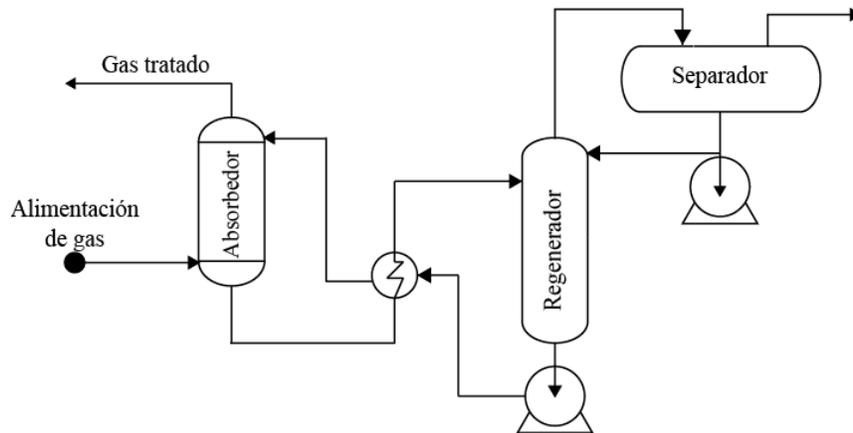


FIGURA 1.3

Diagrama de flujo del proceso Econamina

1.1.2 Diagramas de Flujo y Análisis de Procesos Reactivos con Recirculación y Purga.

Un problema común que se presenta en procesos con recirculaciones es la acumulación de compuestos en la unidad de proceso reactor y en la corriente de reciclaje, para controlar este inconveniente se utiliza la purga (corriente 7) de una parte de la corriente del reciclo del sistema (corriente 5), como se muestra en la figura 1.4.

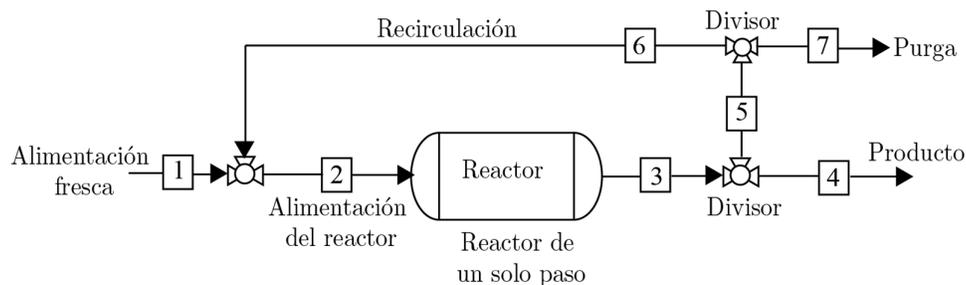
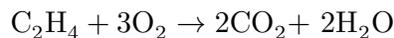
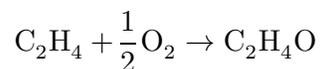


FIGURA 1.4

Diagrama de flujo de un proceso con reciclo y purga

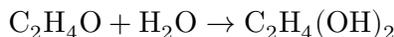
Un ejemplo industrial que involucra una corriente de recirculación, una reacción química y una corriente de purga, es el proceso de producción de etilenglicol (EG); usado en un 50% para la fabricación de fibras de poliéster y un 25% como anticongelante, la formación del EG ocurre en dos pasos.

Paso 1: Una corriente de etileno y otra corriente de aire ingresan al reactor 1, en donde, se lleva a cabo una reacción de oxidación parcial para formar óxido de etileno gaseoso. Sin embargo también pueden generarse gases indeseables como el CO_2 y vapor de H_2O .



El etileno que no se consumió y el N_2 (gas inerte) se reciclan al reactor, mientras que en una columna de absorción son separados el CO_2 , H_2O y $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$. Por otro lado, en la columna de destilación se separa el óxido de etileno y el CO_2 del vapor de agua que es desechado, posteriormente el CO_2 es removido del $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ en una segunda torre de absorción en trietanolamina (TEA), figura 1.5.

Paso 2: El $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ ingresa a un segundo reactor 2 y se mezcla con una corriente de agua para producir etilenglicol.



El óxido de etileno a su vez puede reaccionar con el etilenglicol formado y producir una reacción secundaria indeseable que produce diglicol en menores cantidades.



Finalmente con ayuda de dos torres de destilación continuas se separa el agua y el diglicol del dietilenglicol.

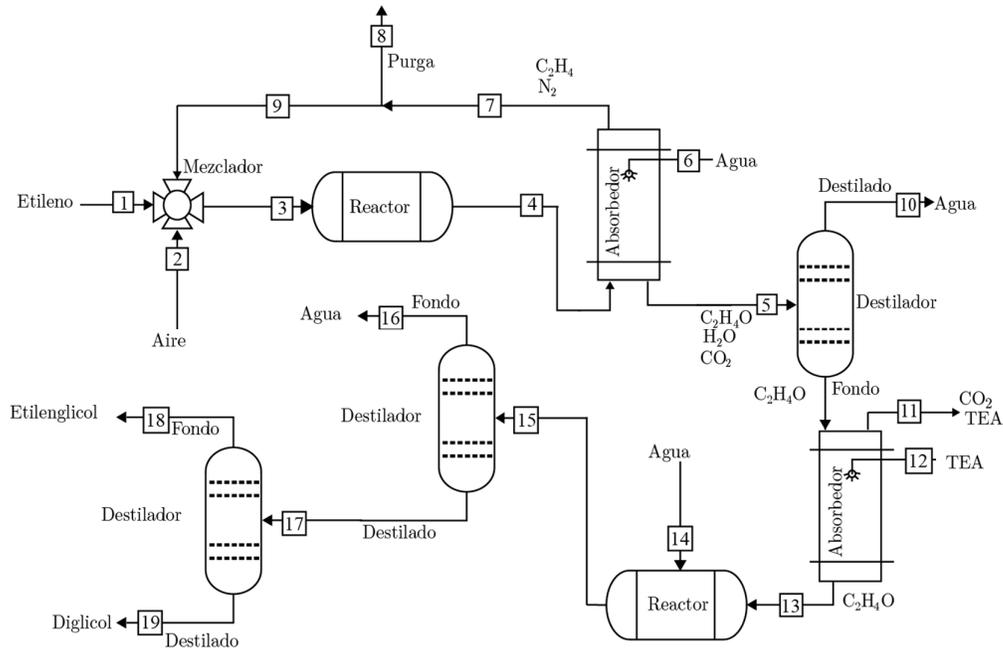


FIGURA 1.5

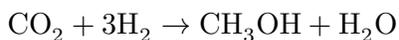
Diagrama de flujo del proceso de producción de etilenglicol incluyendo reciclo y purga

1.2 Análisis de Grados de Libertad (GDL) para Procesos Reactivos de Unidades Múltiples de Proceso

El análisis de grados de libertad tiene el mismo principio para problemas que consten de más de una unidad de proceso con operaciones reactivas. Entonces, se conoce que si el problema no tiene información suficiente para su resolución es un proceso subespecificado, si presenta demasiada información es un problema sobreespecificado, en cambio sí contiene la información necesaria para su desarrollo está completamente especificado y su análisis de grados de libertad es igual a 0.

Ejemplo 1.2 Producción de Metanol.

Una forma de producción de metanol se da mediante la reacción de dióxido de carbono e hidrogeno:



Se alimenta al proceso una corriente que contiene, dióxido de carbono, hidrógeno y 0.3 % molar de un componente inerte (I). La corriente que sale del reactor se dirige a un separador para remover todo el metanol y agua formados, mientras que los reactivos y el componente inerte se enviarán a una corriente de recirculación hacia el reactor. La acumulación de inerte en el reactor se evita extrayendo una corriente de purga de la recirculación. La corriente que alimenta al reactor contiene 35% en moles de CO_2 , 60% en moles de H_2 y 5% en moles de inerte. La conversión en un solo paso de hidrogeno es del 65%.

Determinar los grados de libertad del proceso y calcular las velocidades de flujo molar y composiciones molares de la corriente de alimentación del proceso, la alimentación total al reactor, el flujo molar de la corriente de reciclado, y la corriente de purga para una tasa de producción de 100 mol de CH_3OH /h.

Solución

El esquema del proceso con sus composiciones de corrientes será:

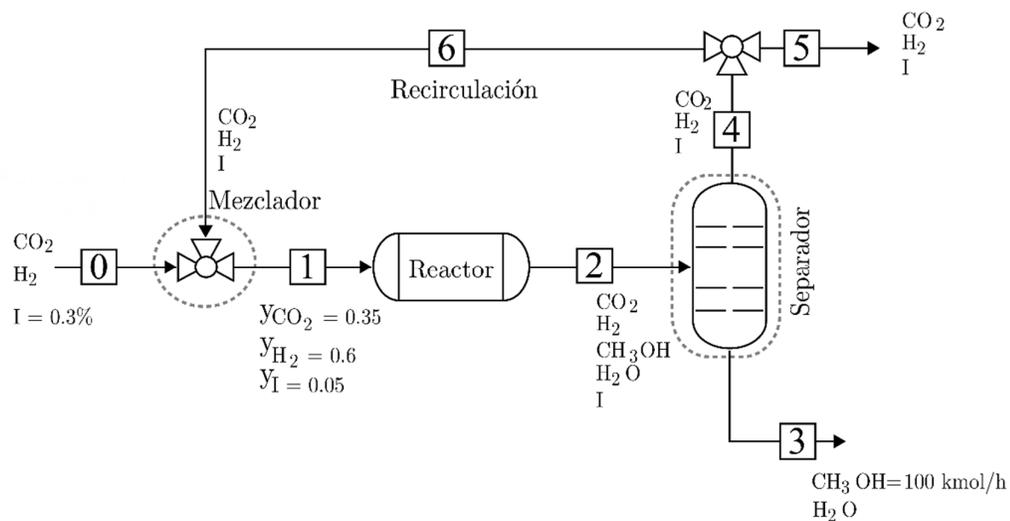


FIGURA DEL EJEMPLO 1.2.1

Diagrama de flujo del proceso de producción de metanol incluyendo reciclo y purga

Se realiza el análisis de grados de libertad para cada unidad de proceso:

	Sistema			Proceso
	Mezclador	Reactor	Separador	general
Número de incógnitas	7	$6+1(\xi)$	9	$7+1(\xi)$
Ecuaciones independientes	3	5	5	5
Relaciones auxiliares	0	1	0	0
GDL	4	1	4	3

Con base al análisis de libertad se establece que el problema presenta un total de 8 números de incógnitas y una misma cantidad entre ecuaciones y relaciones, en el proceso general, por lo tanto se menciona que el proceso está especificado.

El sistema es un proceso de obtención de metanol en estado estacionario.

Se toma como base de cálculo a la tasa de producción de CH_3OH :

$$\dot{n}_{3\text{CH}_3\text{OH}} = 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Balances de materia en el reactor:

El GDL se reduce a cero, dado que todo el metanol formado en el reactor sale en la corriente inferior del separador, es decir: $\dot{n}_{3\text{CH}_3\text{OH}} = \dot{n}_{2\text{CH}_3\text{OH}}$.

Se usa el avance de reacción ξ para establecer los balances de materia, considerando los coeficientes estequiométricos de la reacción (γ_i).

Para el CO_2 :

$$\dot{n}_2 \text{CO}_2 = \dot{n}_1 \text{CO}_2 + \gamma_{\text{CO}_2} \xi$$

$$\dot{n}_2 \text{CO}_2 = y_{\text{CO}_2,1} \times \dot{n}_1 + \gamma_{\text{CO}_2} \xi$$

$$\dot{n}_2 \text{CO}_2 = 0.35\dot{n}_1 - \xi$$

Para el H_2 :

$$\dot{n}_2 \text{H}_2 = \dot{n}_1 \text{H}_2 + \gamma_{\text{H}_2} \xi$$

$$\dot{n}_2 \text{H}_2 = y_{\text{H}_2,1} \times \dot{n}_1 + \gamma_{\text{H}_2} \xi$$

$$\dot{n}_2 \text{H}_2 = 0.6\dot{n}_1 - 3\xi$$

Para el CH_3OH :

$$\dot{n}_2 \text{CH}_3\text{OH} = y_{\text{CH}_3\text{OH},1} \times \dot{n}_1 + \gamma_{\text{CH}_3\text{OH}} \xi$$

No entra metanol al reactor:

$$\dot{n}_2 \text{CH}_3\text{OH} = 0 + \xi$$

Para el H_2O :

$$\dot{n}_2 \text{H}_2\text{O} = y_{\text{H}_2\text{O},1} \times \dot{n}_1 + \gamma_{\text{H}_2\text{O}} \xi$$

No entra agua al reactor:

$$\dot{n}_2 \text{H}_2\text{O} = 0 + \xi$$

Para el compuesto inerte:

Este compuesto no reacciona, por lo tanto, no cambia su velocidad de flujo molar:

$$\dot{n}_{2I} = \dot{n}_{1I}$$

$$\dot{n}_{2_1} = \dot{n}_1 \times y_{\text{H}_2\text{O},1}$$

$$\dot{n}_{2_1} = 0.05 \times \dot{n}_1$$

Para obtener el valor del avance de reacción hay que usar el flujo molar de la corriente 2 del metanol para la entrada al reactor.

$$\dot{n}_{2_{\text{CH}_3\text{OH}}} = 0 + \xi$$

$$100 \frac{\text{mol}}{\text{h}} = 0 + \xi$$

$$\xi = 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Para calcular el flujo molar de hidrógeno en la entrada del reactor, es necesario utilizar la conversión de este componente en el reactor:

Se utilizará la definición de conversión de hidrógeno en el reactor:

$$\frac{\dot{n}_{1_{\text{H}_2}} - \dot{n}_{2_{\text{H}_2}}}{\dot{n}_{1_{\text{H}_2}}} = 0.65$$

Se organiza la ecuación de balance de materia de hidrógeno de manera que se pueda reemplazar en la ecuación de conversión:

$$\dot{n}_{2_{\text{H}_2}} = \dot{n}_{1_{\text{H}_2}} + \gamma_{\text{H}_2} \times \xi$$

$$\dot{n}_{2_{\text{H}_2}} = \dot{n}_{1_{\text{H}_2}} - 3\xi$$

$$\dot{n}_{1_{\text{H}_2}} - \dot{n}_{2_{\text{H}_2}} = 3\xi$$

Con el fin de simplificar la ecuación de conversión, hay que sustituir la ecuación anteriormente determinada.

$$\frac{\dot{n}_{1_{\text{H}_2}} - \dot{n}_{2_{\text{H}_2}}}{\dot{n}_{1_{\text{H}_2}}} = 0.65$$

$$\frac{3\xi}{\dot{n}_{1_{\text{H}_2}}} = 0.65$$

Se arregla la ecuación para obtener el valor de $\dot{n}_{1 \text{ H}_2}$:

$$\dot{n}_{1 \text{ H}_2} = \frac{3\xi}{0.65}$$

Se sustituye el valor de ξ :

$$\dot{n}_{1 \text{ H}_2} = \frac{3 \times 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{0.65}$$

$$\dot{n}_{1 \text{ H}_2} = 461.5385 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

El hidrógeno en la alimentación al reactor es:

$$\dot{n}_{1 \text{ H}_2} = y_{\text{H}_2,1} \times \dot{n}_1$$

$$\dot{n}_{1 \text{ H}_2} = 0.6 \times \dot{n}_1$$

Se reemplazan el valor de $\dot{n}_{1 \text{ H}_2}$:

$$\frac{461.5385 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{0.6} = \dot{n}_1$$

$$\dot{n}_1 = 769.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Se sustituyen los valores de avance de reacción y flujo molar de entrada al reactor en las ecuaciones obtenidas inicialmente para el CO_2 , H_2 , CH_3OH , agua e inerte.

$$\dot{n}_{2 \text{ CO}_2} = 0.35 \times \dot{n}_1 - \xi$$

$$\dot{n}_{2 \text{ CO}_2} = 0.35 \left(769.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \right) - 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}} = 169.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{2 \text{ H}_2} = 0.6\dot{n}_1 - 3\xi$$

$$\dot{n}_{2 \text{ H}_2} = 0.6 \left(769.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \right) - (3)100 \frac{\text{mol}}{\text{h}} = 161.5385 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{2 \text{ CH}_3\text{OH}} = 0 + \xi$$

$$\dot{n}_{2 \text{ CH}_3\text{OH}} = 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{2 \text{ H}_2\text{O}} = 0 + \xi$$

$$\dot{n}_{2 \text{ H}_2\text{O}} = 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{2 \text{ I}} = 0.05 \times \dot{n}_1$$

$$\dot{n}_{2 \text{ I}} = 0.05 \left(769.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \right) = 38.4615 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Balance de materia en el separador:

Toda el agua y metanol saldrán por la corriente 3, mientras que los reactivos e inerte saldrán por la corriente 4:

$$\dot{n}_{4 \text{ H}_2} = 161.5385 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{4 \text{ CO}_2} = 169.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{4 \text{ I}} = 38.4615 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{3 \text{ CH}_3\text{OH}} = 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{3 \text{ H}_2\text{O}} = 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Balance de materia en el divisor:

Para obtener una purga de inerte es necesario un divisor de corrientes:

Se calcula las composiciones molares en la corriente 4, que serán las mismas para la corriente 5 y 6:

$$y_{\text{CO}_2,4} = \frac{\dot{n}_{4 \text{ CO}_2}}{\dot{n}_4} = \frac{\dot{n}_{4 \text{ CO}_2}}{\dot{n}_{4 \text{ CO}_2} + \dot{n}_{4 \text{ H}_2} + \dot{n}_{4 \text{ I}}}$$

$$y_{\text{CO}_2,4} = \frac{169.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{169.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} + 161.5385 \frac{\text{mol}}{\text{h}} + 38.4615 \frac{\text{mol}}{\text{h}}} = 0.4583$$

$$y_{\text{H}_2,4} = \frac{\dot{n}_4 \text{H}_2}{\dot{n}_4}$$

$$y_{\text{H}_2,4} = \frac{161.5385 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{169.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} + 161.5385 \frac{\text{mol}}{\text{h}} + 38.4615 \frac{\text{mol}}{\text{h}}} = 0.437$$

$$y_{\text{I},4} = \frac{\dot{n}_4 \text{I}}{\dot{n}_4}$$

$$y_{\text{I},4} = \frac{38.4615 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{169.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} + 161.5385 \frac{\text{mol}}{\text{h}} + 38.4615 \frac{\text{mol}}{\text{h}}} = 0.1042$$

Balance de materia en el mezclador:

Balance general del mezclador:

$$\dot{n}_0 + \dot{n}_6 = \dot{n}_1$$

$$\dot{n}_0 + \dot{n}_6 = 769.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \quad (\text{i})$$

Se tiene especificada la fracción molar del inerte a la entrada y salida del mezclador, entonces:

$$\dot{n}_{0\text{I}} + \dot{n}_{6\text{I}} = \dot{n}_{1\text{I}}$$

$$0.003\dot{n}_0 + 0.1042\dot{n}_6 = 0.05\dot{n}_1$$

$$0.003\dot{n}_0 + 0.1042\dot{n}_6 = 0.05 \left(769.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \right)$$

$$0.003\dot{n}_0 + 0.1042\dot{n}_6 = 38.4615 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \quad (\text{ii})$$

Resuelvo las ecuaciones (i) y (ii) por sustitución:

$$0.003 \left(769.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} - \dot{n}_6 \right) + 0.1042\dot{n}_6 = 38.4615 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_6 = 357.2510 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Del balance general en el mezclador:

$$\dot{n}_0 + \dot{n}_6 = \dot{n}_1$$

$$\dot{n}_0 = 769.2308 \frac{\text{mol}}{\text{h}} - 357.2510 \frac{\text{mol}}{\text{h}} = 411.9798 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Balance general del sistema:

$$\dot{n}_0 = \dot{n}_3 + \dot{n}_5$$

$$\dot{n}_0 = (\dot{n}_{3 \text{ CH}_3\text{OH}} + \dot{n}_{3 \text{ H}_2\text{O}}) + \dot{n}_5$$

$$411.9798 \frac{\text{mol}}{\text{h}} = \left(100 \frac{\text{mol}}{\text{h}} + 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}\right) + \dot{n}_5$$

$$\dot{n}_5 = 211.9798 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

1.3 Procesos Reactivos en Estado Estacionario de Unidades Múltiples de Proceso

En el momento de resolver problemas que incluyan reacciones químicas y múltiples unidades en un proceso en estado estacionario, se debe considerar algunos puntos:

1. Para unidades con reacciones es recomendable usar flujos de componentes individuales en la unidad de reacción en vez de composiciones, se debe considerar la estequiometría de la reacción, es decir considerar el consumo de reactivos y generación de productos.

Para unidades que no presenten una reacción como: mezcladores, divisores y separadores se resuelve el balance de materia (entrada = salida), excluyendo los términos generación y consumo. Además, se pueden especificar composiciones y flujos.

2. Para sistemas que implican reacciones combinadas con recirculación:

Los flujos que se reciclan son usados con el fin de recuperar y reutilizar un reactivo. Recircular una corriente permite el funcionamiento del reactor a baja conversión en un solo paso.

3. Unidades que involucran reacciones y purga:

La eliminación de una corriente o purga evita la acumulación de inerte en el sistema.

El punto de purga es un divisor simple, el cual presenta la misma composición en las corrientes de entrada y salidas.

Ejemplo 1.3 Producción de Amoníaco con una Corriente de Reciclo.

A un reactor ingresan cantidades estequiométricas de gases nitrógeno e hidrógeno para producir amoníaco. El nitrógeno tiene una conversión en amoníaco del 35%. Debido a que en la reacción de un solo paso, los gases de alimentación no reaccionan totalmente, se separan de la corriente de productos y se reciclan de vuelta al reactor.

Calcular la cantidad de nitrógeno requerido para producir 350 kmol/h y el caudal que se recicla al reactor.

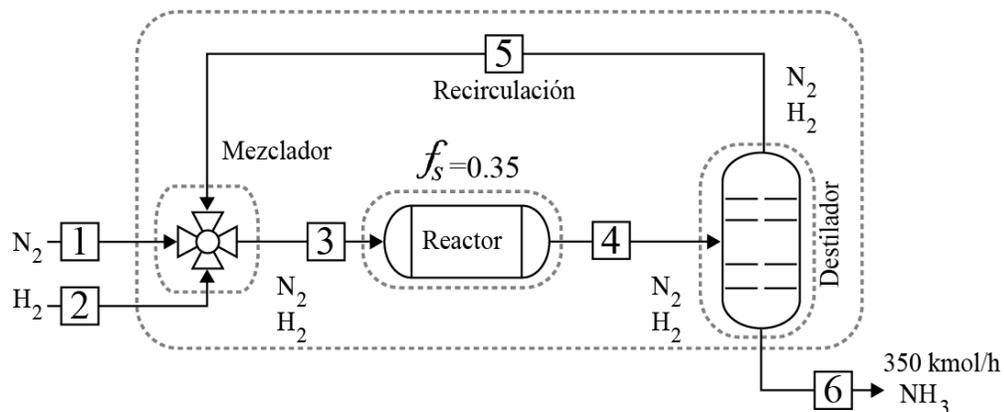


FIGURA DEL EJEMPLO 1.3.1

Esquema de producción de amoníaco con una corriente de reciclo

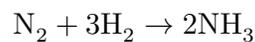
Solución

Realizar un análisis de grados de libertad por cada unidad de proceso.

	Sistema		
	Reactor	Destilador	P. general
Número de incógnitas	5+1 (ξ)	5	2+1(ξ)
Número de ecuaciones independientes	3	3	3
Relaciones auxiliares	2	0	0
GDL	1	2	0

El proceso general se encuentra especificado, debido a que mediante el análisis de grados de libertad se determina que existe la misma cantidad de incógnitas y ecuaciones.

La producción de amoníaco se desarrolla de acuerdo con la siguiente reacción.



El problema trabaja en estado estacionario, por tanto, la acumulación es igual a cero.

Dado que en el sistema se presenta una reacción química, se debe considerar que el número de moles no suelen conservarse y los átomos pueden cambiar de una molécula a otra. Entonces:

$$\text{Masa de entrada} = \text{Masa de salida}$$

Átomos de entrada = Átomos de salida

Balance atómico general para el N₂:

$$2 \dot{n}_1 = 350 \frac{\text{kmol N}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_1 = \frac{350 \frac{\text{kmol N}}{\text{h}}}{2} = 175 \frac{\text{kmol N}}{\text{h}}$$

Balance atómico general para el H₂:

$$2 \dot{n}_2 = 3 \times 350 \frac{\text{kmol H}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_2 = \frac{1050 \frac{\text{kmol H}}{\text{h}}}{2}$$

$$\dot{n}_2 = 525 \frac{\text{kmol H}}{\text{h}}$$

Balance en el reactor:

El ejercicio menciona una conversión de nitrógeno a amoníaco del 35%, esta viene dada por la siguiente ecuación:

$$\text{Conversión} = f_A = \frac{\text{Moles de N}_2 \text{ que reaccionaron}}{\text{Moles de N}_2 \text{ de alimentación}} = \frac{\dot{n}_{3\text{N}_2} - \dot{n}_{4\text{N}_2}}{\dot{n}_{3\text{N}_2}}$$

Balance molar para el NH₃:

$$\dot{n}_{4\text{NH}_3} = 0 + 2\xi$$

Todo el amoníaco producido en el reactor sale por la corriente inferior del destilador.

$$\dot{n}_{4\text{NH}_3} = \dot{n}_{6\text{NH}_3}$$

$$\dot{n}_{6\text{NH}_3} = 350 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Reemplazar el valor de $\dot{n}_{\text{NH}_3,6}$ en el balance molar del NH_3 para encontrar el valor del avance de reacción ξ :

$$\begin{aligned}\dot{n}_{4\text{NH}_3} &= 0 + 2\xi \\ 350 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} &= 0 + 2\xi \\ \xi &= 175 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\end{aligned}$$

El valor de avance de reacción está relacionado con la conversión propia del reactor.

Conversión:

$$\begin{aligned}f = 0,35 &= \frac{\dot{n}_{3\text{N}_2} - \dot{n}_{4\text{N}_2}}{\dot{n}_{3\text{N}_2}} = \frac{\xi}{\dot{n}_{3\text{N}_2}} = \frac{175 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{\dot{n}_{3\text{N}_2}} \\ \dot{n}_{3\text{N}_2} &= \frac{175 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{0,35} = 500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\end{aligned}$$

La cantidad de hidrógeno que ingresa al reactor es tres veces mayor a la cantidad de nitrógeno debido a la relación estequiométrica a la entrada.

$$\begin{aligned}\dot{n}_{3\text{H}_2} &= 3\dot{n}_{3\text{N}_2} \\ \dot{n}_{3\text{H}_2} &= 3 \times 500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \\ \dot{n}_{3\text{H}_2} &= 1500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\end{aligned}$$

Balance molar para el N_2 :

$$E - S + G - C = A$$

$$E - S + \xi = 0$$

$$\dot{n}_{4N_2} = \dot{n}_{3N_2} - \xi = 500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 175 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{4N_2} = 325 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Hay que reconsiderar el dato de proporción estequiométrica a la entrada del reactor, para obtener el flujo de H_2 .

$$\dot{n}_{4H_2} = 3\dot{n}_{4N_2} = 3 \times 325 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{4H_2} = 975 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Se genera una corriente de reciclo de los componentes de nitrógeno e hidrógeno que no reaccionaron. Entonces la corriente total de reciclaje (\dot{n}_5) es:

$$\dot{n}_5 = \dot{n}_{5H_2} + \dot{n}_{4N_2}$$

$$\dot{n}_5 = 325 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 975 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_5 = 1300 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Ejemplo 1.4 Producción de Amoniaco con un Gas Inerte en la

Entra a un proceso una corriente gaseosa compuesta de hidrógeno, nitrógeno y 0.3% de argón como impureza. El hidrógeno y nitrógeno se encuentran en una proporción estequiométrica. Se requiere reciclar la los reactivos incluyendo la impureza, para evitar la acumulación de Ar en el reactor y evitar que afecte la reacción, se purgará una parte de la corriente de reciclo para mantener en 6% la composición molar de Ar en la corriente. La conversión fraccional es de 0.3.

¿Cuánto nitrógeno se requerirá para producir 300 kmol/h de amoniaco? ¿Cuál es el flujo molar de la corriente de reciclaje?

Calcular los flujos molares de nitrógeno e hidrógeno en la corriente de purga.

Solución

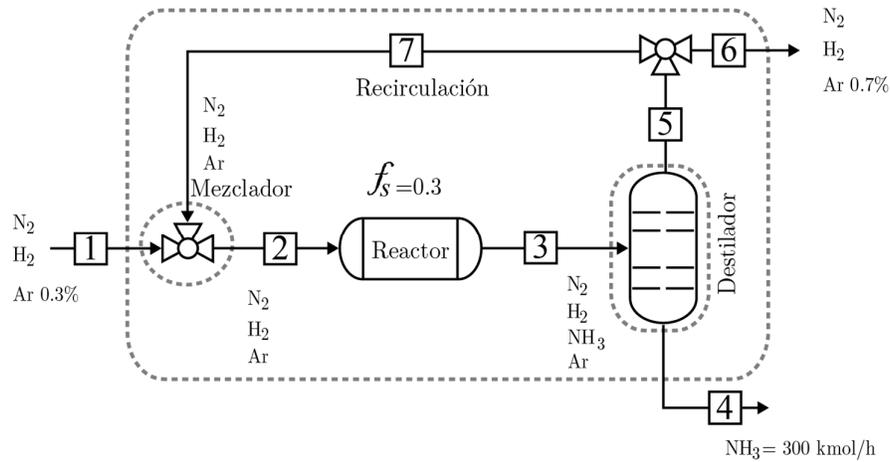


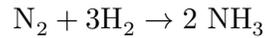
FIGURA DEL EJEMPLO 1.4.1

Esquema de producción de amoniaco con una corriente de reciclo y purga

Se realiza el análisis de grados de libertad para cada unidad de proceso:

		Sistema			
		Reactor	Separador	Divisor	Proceso general
Número de incógnitas		$7+1(\xi)$	7	4	$4+1(\xi)$
Número de ecuaciones independientes		4	4	1	4
Relaciones auxiliares		1	0	0	0
GDL		3	3	2	0

La reacción para obtener amoníaco será:



Se conoce que las fracciones parciales de todos los componentes de una corriente deben sumar uno, entonces:

Corriente de recirculación:

$$y_{\text{N}_2,7} + y_{\text{H}_2,7} + y_{\text{Ar},7} = 1$$

Se conoce el valor de la fracción parcial de Argón el corriente de recirculación:

$$y_{\text{N}_2,7} + y_{\text{H}_2,7} + 0.06 = 1 \quad (\text{i})$$

Ahora se analiza la relación estequiométrica entre el nitrógeno y el hidrógeno, dado que el hidrogeno y el amoníaco entran al sistema en proporción estequiométrica, en todo el sistema se tendrá 3 moles de hidrogeno por cada mol de nitrógeno:

$$\frac{y_{\text{N}_2,7}}{y_{\text{H}_2,7}} = \frac{1}{3}$$

$$3y_{\text{N}_2,7} = y_{\text{H}_2,7} \quad (\text{ii})$$

Se remplazará la ecuación (2) en (1):

$$y_{\text{N}_2,7} + y_{\text{H}_2,7} + 0.06 = 1$$

$$y_{\text{N}_2,7} + 3y_{\text{N}_2,7} + 0.06 = 1$$

$$y_{\text{N}_2,7} = 0.235$$

Por sustitución del valor encontrado se encuentra la fracción parcial del hidrógeno:

$$y_{\text{H}_2,7} = 0.705$$

Las composiciones molares en las corrientes 5, 6 y 7 son iguales, dado que la purga se realiza por medio de un divisor. Cuando existen reacciones los átomos de una molécula pueden pasar a formar otra molécula y así cambiar sus moles iniciales, por esta razón, se realizan balances atómicos para las especies que participan en una reacción:

Balance atómico general para el nitrógeno:

$$2\dot{n}_{1N} = \dot{n}_{4N} + 2\dot{n}_{6N}$$

Por estequiometria saldrán 245 kmol/h de nitrógeno atómico en la corriente 4, entonces:

$$2\dot{n}_1 \times y_{N_2,1} = \dot{n}_4 + 2\dot{n}_6 \times y_{N_2,6} \quad (\text{iii})$$

$$\dot{n}_4 = 300 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}, \quad y_{N_2,1} = 0.2493, \quad y_{N_2,6} = 0.235$$

Se sustituyen los valores en la ecuación (iii):

$$(2)0.2493 \times \dot{n}_1 = 300 + (2)0.235 \times \dot{n}_6$$

$$(2)0.2493 \times \dot{n}_1 = 300 + (2)0.235 \times \dot{n}_6 \quad (\text{iv})$$

Balance general para el argón:

$$\dot{n}_{1Ar} = \dot{n}_{6Ar}$$

$$\dot{n}_1 \times y_{Ar,1} = \dot{n}_6 \times y_{N_2,6} \quad (\text{v})$$

Se sustituyen los valores conocidos en la ecuación (v):

$$0.003 \times \dot{n}_1 = 0.06 \times \dot{n}_6$$

$$\dot{n}_1 = 20 \times \dot{n}_6 \quad (\text{vi})$$

Se resuelve un sistema de ecuaciones entre (iv) y (vi):

$$\dot{n}_6 = 31.5723 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_1 = 20\dot{n}_6$$

$$\dot{n}_1 = 20 \left(31.5723 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) = 631.446 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de materia en el reactor:

Para el nitrógeno:

$$\dot{n}_{3,N_2} = \dot{n}_{2,N_2} - \xi$$

Para el amoníaco:

$$\dot{n}_{3,NH_3} = \dot{n}_{2,NH_3} + 2\xi$$

$$300 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 0 + 2\xi$$

Se obtiene el valor del avance de reacción:

$$\xi = 150 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Se utiliza la conversión del nitrógeno en el reactor:

$$f_{N_2} = 0.3$$

La conversión será igual:

$$0.3 = \frac{\dot{n}_{2,N_2} - \dot{n}_{3,N_2}}{\dot{n}_{2,N_2}} \quad (\text{vii})$$

Se tiene:

$$\dot{n}_{2,N_2} - \dot{n}_{3,N_2} = \xi \quad (\text{viii})$$

Se reemplaza la ecuación (vii) en (viii):

$$0.3 = \frac{\xi}{\dot{n}_{2,N_2}}$$

$$0.3 = \frac{150 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{\dot{n}_{2,N_2}}$$

$$\dot{n}_{2,N_2} = 500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Como el nitrógeno y el hidrógeno están en proporción estequiométrica:

$$\dot{n}_{2,H_2} = 3\dot{n}_{2,N_2}$$

$$\dot{n}_{2,H_2} = 3 \times 500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 1500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Con el resultado anterior se calcula \dot{n}_{3,N_2} :

$$\dot{n}_{3,N_2} = \dot{n}_{2,N_2} - \xi$$

$$\dot{n}_{3,N_2} = 500 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 150 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 350 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Se calcula \dot{n}_{3H_2} con la misma relación estequiométrica:

$$\dot{n}_{3,H_2} = 3\dot{n}_{3,N_2}$$

$$\dot{n}_{3H_2} = 3 \times 350 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 1050 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

El nitrógeno e hidrógeno en la corriente 3 será el mismo en la corriente 5:

$$\dot{n}_{3,H_2} + \dot{n}_{3,N_2} = \dot{n}_{5,H_2} + \dot{n}_{5,N_2}$$

$$\dot{n}_{5,H_2} + \dot{n}_{5,N_2} = 1050 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 350 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 1400 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Se sabe que las composiciones en las corrientes 5,6 y 7 son iguales.

Entonces, la suma de las composiciones de nitrógeno e hidrógeno en la corriente 5 será 0.93:

$$(y_{N_2,5} + y_{H_2,5})\dot{n}_5 = \dot{n}_{5,H_2} + \dot{n}_{5,N_2}$$

$$0.93\dot{n}_5 = \dot{n}_{5,H_2} + \dot{n}_{5,N_2}$$

$$0.93\dot{n}_5 = 1400 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_5 = 1505.3763 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de materia en el divisor:

$$\dot{n}_5 = \dot{n}_6 + \dot{n}_7$$

$$\dot{n}_7 = \dot{n}_5 - \dot{n}_6$$

$$\dot{n}_7 = 1505.3763 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 31.5723 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 1473.8040 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Corriente de purga:

En la corriente de purga \dot{n}_6 se tiene las mismas composiciones que en la corriente 5 y 7:

$$y_{N_2,6} = 0.235$$

$$y_{H_2,6} = 0.705$$

$$y_{Ar,6} = 0.06$$

Para el N_2 :

$$\dot{n}_{6,N_2} = y_{N_2,6} \times \dot{n}_6$$

$$\dot{n}_{6,N_2} = 0.235 \times 31.5723 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 7.4195 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Para el H_2 :

$$\dot{n}_{6,H_2} = y_{H_2,6} \times \dot{n}_6$$

$$\dot{n}_{6,H_2} = 0.705 \times 31.5723 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 22.2585 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Para el Ar:

$$\dot{n}_{6,\text{Ar}} = y_{\text{Ar},6} \times \dot{n}_6$$

$$\dot{n}_{6,\text{Ar}} = 0.06 \times 31.5723 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 1.8943 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Ejemplo 1.5 Síntesis de Amoniaco con dos Corrientes de Alimentación Fresca

A un mezclador ingresan dos corrientes frescas y una recirculación, la corriente fresca de nitrógeno contiene 0.15% de argón (Ar) que se mezclara estequiométricamente con nitrógeno y otra corriente de hidrogeno.

El nitrógeno, hidrogeno y argón que salen del mezclador ingresan a un reactor donde se producirá amoniaco con una conversión del 0.30 de un solo paso, los productos y reactivos que no reaccionaron se retiran del reactor y se ingresan a un separador obteniendo una corriente de nitrógeno hidrogeno y argón que se recirculan al mezclador y otra corriente que se obtiene el producto deseado de amoniaco. Debido a que el argón es un gas inerte y al existir una recirculación, el argón puede acumularse hasta llegar a detener la reacción. Para evitar que se acumule el argón se instala una purga en la corriente de reciclaje que contendrá un 5%.

Calcular el flujo molar de la purga, el flujo molar de nitrógeno en la alimentación fresca que se requiere para producir 250 kmol/h y la velocidad de flujo molar de la corriente de recirculación.

Solución

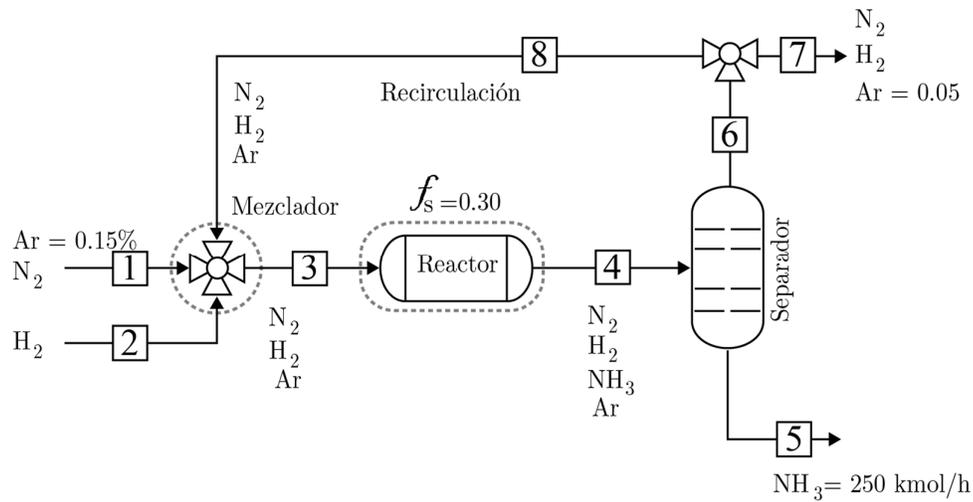


FIGURA DEL EJEMPLO 1.5.1

Esquema para la producción de amoniaco con alimentación de inerte

Para resolver este problema se debe realizar balances del sistema en general, en el separador, reactor y divisor

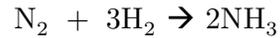
Base de cálculo: 250 kmol/h

Análisis de grados de libertad.

Sistema dentro del control de volumen

	Reactor	Separador	Divisor	Proceso general
Número de incógnitas	$7 + 1(\xi)$	7	3	$4 + 1(\xi)$
Ecuaciones independientes	4	4	1	4
Relaciones auxiliares	1	—	—	1
GDL	3	3	2	0

La reacción para este proceso es:



Debido a que el nitrógeno y el hidrógeno se alimentan en proporciones estequiométricas, por 1 mol de nitrógeno se tendrá 3 mol de hidrógeno se tendrá:

$$3y_{\text{N}_2} = y_{\text{H}_2} \quad (\text{i})$$

Para la corriente 7

$$y_{\text{N}_2,7} + y_{\text{H}_2,7} + y_{\text{Ar},7} = 1 \quad (\text{ii})$$

Reemplazo (i) en (ii)

$$y_{\text{N}_2,7} + 3y_{\text{N}_2,7} + y_{\text{Ar},7} = 1$$

$$4y_{\text{N}_2,7} + 0.05 = 1$$

$$y_{\text{N}_2,7} = 0.2375$$

Reemplazo $y_{\text{N}_2,7}$ en la ecuación (ii)

$$0.2375 + y_{\text{H}_2,7} + 0.05 = 1$$

$$y_{\text{H}_2,7} = 0.7125$$

La corriente 7 se obtiene de la mezcla de la corriente 6, por tanto las composiciones de la corriente 6, 7, 8 son las mismas.

Balace general para el argón

$$E = S$$

$$y_{\text{Ar},1} \dot{n}_1 = y_{\text{Ar},7} \dot{n}_7$$

$$0.0015 \dot{n}_1 = 0.05 \dot{n}_7$$

$$\dot{n}_1 = 33.33 \dot{n}_7 \quad (\text{iii})$$

Fracción de nitrógeno en la corriente 1

$$y_{Ar,1} + y_{N_2,1} = 1$$

$$0.0015 + y_{N_2,1} = 1$$

$$y_{N_2,1} = 0.9985$$

Balance atómico del nitrógeno.

Se tiene nitrógeno en la corriente 1 (2 átomos), en la corriente 7 (2 átomos), en la corriente 5 (1 átomo), por tanto:

$$E = S$$

$$2(0.9985 \times \dot{n}_1) = 250 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 2(0.2375 \times \dot{n}_7)$$

$$1.997 \times \dot{n}_1 = 250 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 0.475 \times \dot{n}_7 \quad (\text{iv})$$

Reemplazar (iii) en (iv) para calcular el flujo molar de la purga

$$1.997(33.33 \times \dot{n}_7) = 250 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 0.475 \times \dot{n}_7 \quad (\text{iv})$$

$$\dot{n}_7 = 3,783 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Reemplazar \dot{n}_7 en (iii)

$$\dot{n}_1 = 33.33 \left(3,783 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right)$$

$$\dot{n}_1 = 126,074 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

El flujo molar que ingresa de nitrógeno fresco será:

$$\dot{n}_{1,N_2} = y_{N_2,1} \times \dot{n}_1$$

$$\dot{n}_{1,N_2} = (0.9985) \left(126,074 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right)$$

$$\dot{n}_{1,N_2} = 125,885 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balances por componentes en el reactor

Balance para el amoniaco

$$E - S + G - C = A$$

Al amoniaco no se consume y no entra al reactor solo se genera y no existe acumulación, por tanto:

$$-S + G = 0$$

$$-\dot{n}_{4,NH_3} + 2\xi = 0$$

El flujo molar de amoniaco de la corriente 5 es el mismo de la corriente 4

$$-250 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 2\xi = 0$$

$$\xi = 125 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance para el nitrógeno

$$E - S + G - C = A$$

Al amoniaco no se genera y no existe acumulación, por tanto:

$$E - S - C = 0$$

$$\dot{n}_{3,N_2} - \dot{n}_{4,N_2} - \xi = 0$$

Para la conversión del nitrógeno

$$f_A = 0.30 = \frac{\dot{n}_{3,N_2} - \dot{n}_{4,N_2}}{\dot{n}_{3,N_2}} = \frac{\xi}{\dot{n}_{3,N_2}} = \frac{125 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{\dot{n}_{3,N_2}}$$

$$\dot{n}_{3,N_2} = 416.667 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Debido a la relación estequiometria de 3 a 1 entre el hidrogeno y nitrógeno se tiene que:

$$\dot{n}_{3,H_2} = 3\dot{n}_{3,N_2} = 3 \left(416.667 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) = 1250 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Calcular el flujo molar de nitrógeno en la corriente 4

$$E - S + G - C = A$$

Al nitrógeno en el reactor no se genera solo se consume y no existe acumulación, por tanto:

$$E - S - C = 0$$

$$\dot{n}_{3,N_2} - \dot{n}_{4,N_2} - \xi = 0$$

$$416.667 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - \dot{n}_{4,N_2} - 125 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 0$$

$$\dot{n}_{4,N_2} = 291.6677 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Calcular el flujo molar de nitrógeno en la corriente 4:

Debido a la relación estequiometria de 3 a 1 entre el hidrogeno y nitrógeno se tiene que:

$$\dot{n}_{4,H_2} = 3\dot{n}_{4,N_2} = 3 \left(291.6677 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) = 875 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Todo el nitrógeno e hidrogeno de la corriente 4 es el mismo de la corriente 6 por tanto:

$$\dot{n}_{4,H_2} + \dot{n}_{4,N_2} = \dot{n}_{6,H_2} + \dot{n}_{6,N_2}$$

$$875 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 291.6677 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = \dot{n}_{6,H_2} + \dot{n}_{6,N_2} = 1166.6677 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Como las composiciones molares de las corrientes 6,7 y 8 son idénticas se sabe que la composición del argón es de 0.05 por tanto la composición de hidrogeno y nitrógeno es 0.95 por tanto.

$$\dot{n}_{6,H_2} + \dot{n}_{6,N_2} = 0.95\dot{n}_6$$

$$1166.6677 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 0.95 \dot{n}_6$$

$$\dot{n}_6 = 1228.07 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance en el divisor de la corriente de recirculación.

$$\dot{n}_6 = \dot{n}_7 + \dot{n}_8$$

$$\dot{n}_8 = \dot{n}_6 - \dot{n}_7$$

$$\dot{n}_8 = 1228.07 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 3,783 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_8 = 1224.288 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Ejemplo 1.6 Síntesis de Amoniaco con una Corriente de Reciclo con Amoniaco.

Para producir 100 kmol/h de amoníaco a un reactor ingresan estequiométricamente dos corrientes; una compuesta de 99,8% de nitrógeno y 0,2% de argón mientras que la otra corriente es de hidrógeno. Los productos de la reacción se separan en un condensador, obteniendo amoniaco en el fondo. El hidrógeno, el nitrógeno y el amoníaco no condensados se reciclan y se combinan con la corriente de nitrógeno e hidrógeno que ingresa al reactor.

Una parte de la corriente de reciclaje se purga manteniendo a la fracción molar de argón en 0,07 y la fracción molar de amoníaco en la corriente de purga es 0,236. Parte del amoniaco que no se condensa como producto es reciclado. Obtenga por medio de cálculos el caudal molar de la corriente de reciclaje.

Solución

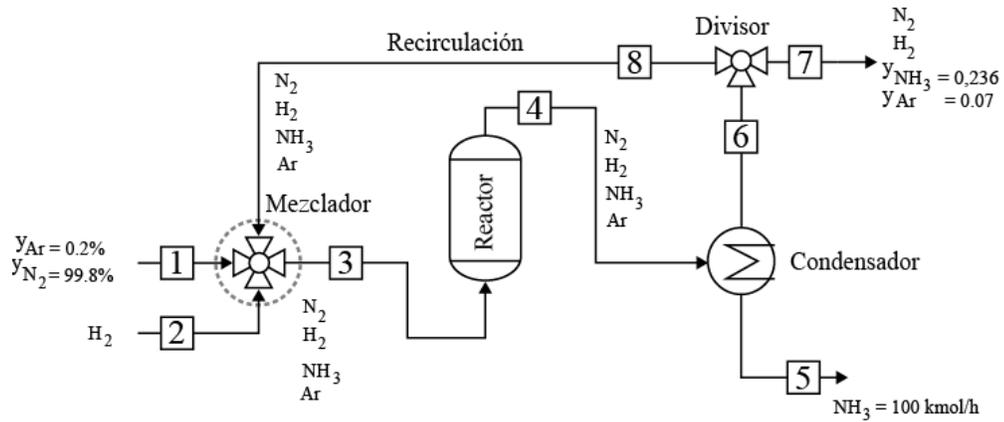
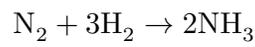


FIGURA DEL EJEMPLO 1.6

Esquema de síntesis de amoníaco con una corriente de reciclo con amoníaco.

La producción de amoníaco se desarrolla de acuerdo con la siguiente reacción:



Composición de la corriente 1:

$$0.998 \text{ N}_2 \text{ y } 0.002 \text{ Ar}$$

Análisis de fracciones molares en la corriente de purga:

$$0.07 + x_{\text{N}_2,7} + 3x_{\text{N}_2,7} + 0.236 = 1$$

$$x_{\text{N}_2,7} = 0.167$$

Balance entre las corrientes 6, 7 y 8.

Balance de fracción molar de N_2 :

$$x_{\text{N}_2,6} = x_{\text{N}_2,7} = x_{\text{N}_2,8} = 0.167$$

Balance de fracción molar de H_2 :

$$x_{\text{H}_2,6} = x_{\text{H}_2,7} = x_{\text{H}_2,8} = 0.527$$

Balance de fracción molar de Ar:

$$x_{\text{Ar},6} = x_{\text{Ar},7} = x_{\text{Ar},8} = 0.070$$

Balance de fracción molar de NH₃:

$$x_{\text{NH}_3,6} = x_{\text{NH}_3,7} = x_{\text{NH}_3,8} = 0.236$$

Balances atómicos de generales

Balance atómico de Ar:

$$y_{\text{Ar},1} \dot{n}_1 = y_{\text{Ar},7} \dot{n}_7$$

$$0.002 \dot{n}_1 = 0.07 \dot{n}_7$$

$$\dot{n}_1 = \frac{0.07}{0.002} \dot{n}_7$$

$$\dot{n}_1 = 35\dot{n}_7 \quad (\text{i})$$

Balance atómico de N₂:

$$2 \times 0.998 \times \dot{n}_1 = 100 + (2 \times 0.167 \dot{n}_7) + 0.263 \dot{n}_7 \quad (\text{ii})$$

Reemplazar la ecuación (i) en la ecuación (ii):

$$2 \times 0.998 \times 35 \times \dot{n}_7 = 100 + (2 \times 0.167 \times \dot{n}_7) + 0.263 \times \dot{n}_7$$

Despejar el valor de \dot{n}_7 :

$$\dot{n}_7 = 1,443 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_1 = 50.51 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Flujo molar de N₂ en la entrada:

$$\dot{n}_{1\text{N}_2} = 0.998 \times 50.51 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{1\text{N}_2} = 50.4 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

El flujo de nitrógeno tiene una relación estequiométrica con el flujo de alimentación de hidrógeno.

$$\dot{n}_{2N_2} = 3 \times \dot{n}_{1N_2}$$

$$\dot{n}_{2N_2} = 3 \times 50.4 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{2N_2} = 151,2 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance en reactor

El ejercicio proporciona el valor de la conversión fraccional del hidrógeno.

$$\text{Conversión} = f_{H_2} = \frac{\text{Moles de } H_2 \text{ que reaccionaron}}{\text{Moles de } H_2 \text{ de alimentación}} = \frac{\dot{n}_{3,H_2} - \dot{n}_{4,H_2}}{\dot{n}_{3,H_2}}$$

El flujo molar de hidrógeno en la corriente 8 tiene relación con la corriente 4.

$$\dot{n}_{4,H_2} = 0.5 \left(\dot{n}_8 + 1.44 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) \quad (\text{iii})$$

La fracción molar de hidrógeno en la corriente que sale por la cabeza del condensador y se calculó un valor de 1.44 kmol/h en la corriente 7 (purga).

$$\dot{n}_{3,H_2} = 151 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 0.5 \dot{n}_8 \quad (\text{iv})$$

Reemplazar las ecuaciones (iii) y (iv) en la relación de conversión

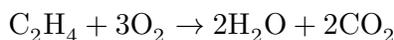
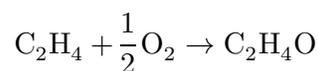
$$0.10 = \frac{151 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 0.5 \dot{n}_8 - 0.5 \left(\dot{n}_8 + 1.44 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right)}{151 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 0.5 \dot{n}_8}$$

$$0.10 = \frac{151 - 0.5 \times 1.44}{151 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 0.5 \dot{n}_8}$$

$$\dot{n}_8 = 2703.6 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Ejemplo 1.7 Producción de óxido de etileno con recirculación y purga.

Por la operación de oxidación parcial del etileno en una reacción en fase gaseosa se obtiene el óxido de etileno ($\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$). Al proceso se alimenta 100 mol/h de etileno puro el cual se mezcla con aire de composición 21% oxígeno y su diferencia de nitrógeno. La relación molar entre el etileno en la alimentación fresca y el oxígeno es de 2:1. En el reactor el etileno tiene una conversión del 25%. Del reactor salen los siguientes compuestos: etileno, óxido de etileno, agua, CO_2 y N_2 , considerando el consumo total del oxígeno. La corriente de salida del reactor se separa idealmente en una torre de separación en la que el etileno y el nitrógeno salen por la corriente de gas, una parte de esta corriente se purga del sistema y el resto se mezcla con las corrientes frescas de etileno y aire. Los gases restantes (óxido de etileno, agua y CO_2) salen por la parte inferior de la torre, en donde existe un total de 50 mol/h de CO_2 . En el reactor se presentan dos reacciones que se desarrollan a la vez; procediendo de acuerdo con la siguiente estequiometría:



Determine la cantidad de óxido de etileno que se produce, las composiciones de inerte y oxígeno que ingresan en la alimentación, y los valores de avance de cada reacción que participa en el reactor.

Solución

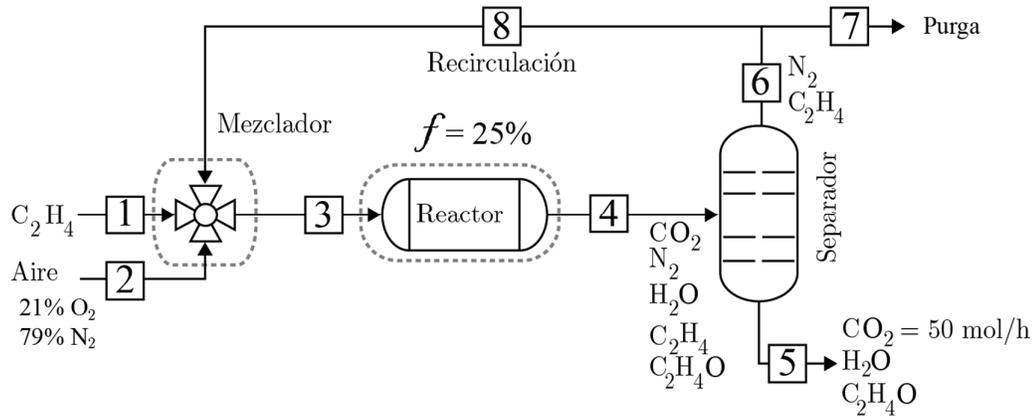


FIGURA DEL EJEMPLO 1.7

Esquema de síntesis de etanol con reciclo y purga

Flujos de alimentación

$$\dot{n}_{1,C_2H_4} = 100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

El etileno ingresa en una relación con el oxígeno de 2:1.

$$\frac{\dot{n}_{1,C_2H_4}}{\dot{n}_{2,O_2}} = \frac{2}{1}$$

$$\frac{100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{\dot{n}_{2,O_2}} = \frac{2}{1}$$

$$\dot{n}_{2,O_2} = 50 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

El aire que se alimenta tiene una composición de 21% de oxígeno y 79% de nitrógeno.

$$\dot{n}_{2,N_2} = \frac{50 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \times 79}{21} = 188.09 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Balace en el mezclador:

$$\dot{n}_{1,C_2H_4} + \dot{n}_{8,C_2H_4} = \dot{n}_{3,C_2H_4}$$

$$\dot{n}_{2,N_2} + \dot{n}_{8,N_2} = \dot{n}_{3,N_2}$$

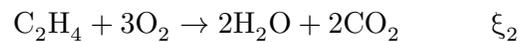
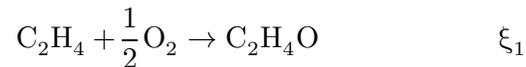
$$\dot{n}_{2,O_2} = \dot{n}_{3,O_2} = 50 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Balance en el reactor:

$$E - S + G - C = A$$

El consumo y generación de la ecuación de balance general de masa se simplifican considerando el avance de reacción (ξ), el proceso se desarrolla en estado estacionario, entonces la acumulación del proceso es igual a cero.

$$E - S + \xi_1 = 0$$



$$\text{Conversión} = \frac{\dot{n}_{3,\text{C}_2\text{H}_4} - \dot{n}_{4,\text{C}_2\text{H}_4}}{\dot{n}_{3,\text{C}_2\text{H}_4}}$$

$$0.25 = \frac{100 \frac{\text{mol}}{\text{h}} - \dot{n}_{4,\text{C}_2\text{H}_4}}{100 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}$$

$$\dot{n}_{4,\text{C}_2\text{H}_4} = 75 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Balance por componentes en el reactor:

$$\dot{n}_{3,\text{C}_2\text{H}_4} - \dot{n}_{4,\text{C}_2\text{H}_4} - \xi_1 - \xi_2 = 0$$

$$\dot{n}_{3,\text{C}_2\text{H}_4} - 75 \frac{\text{mol}}{\text{h}} - \xi_1 - \xi_2 = 0$$

$$\dot{n}_{3,\text{N}_2} = \dot{n}_{4,\text{N}_2} = 188.09 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{3,O_2} - \frac{1}{2}\xi_1 - 3\xi_2 = 0$$

$$50 \frac{\text{mol}}{\text{h}} - \frac{1}{2}\xi_1 - 3\xi_2 = 0 \quad (\text{i})$$

$$-\dot{n}_{4,C_2H_4O} + \xi_1 = 0 \quad (\text{ii})$$

$$-\dot{n}_{4,H_2O} + 2 \xi_2 = 0 \quad (\text{iii})$$

$$-\dot{n}_{4,CO_2} + 2 \xi_2 = 0 \quad (\text{iv})$$

Balance en el separador:

$$\dot{n}_{4,CO_2} = \dot{n}_{5,CO_2}$$

$$\dot{n}_{4,CO_2} = 5 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Reemplazar \dot{n}_{4,CO_2} en (iv)

$$-5 \frac{\text{mol}}{\text{h}} + 2 \xi_2 = 0$$

$$\xi_2 = 2.5 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Reemplazar ξ_2 en (iii)

$$-\dot{n}_{4,H_2O} + 2 \left(2.5 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \right) = 0$$

$$\dot{n}_{4,H_2O} = \frac{5 \text{mol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{4,H_2O} = \dot{n}_{5,H_2O}$$

Reemplazar ξ_2 en (i)

$$50 \frac{\text{mol}}{\text{h}} - \frac{1}{2} \xi_1 - 3 \left(2.5 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \right) = 0$$

$$\xi_1 = 85 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Reemplazar ξ_1 en (ii)

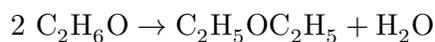
$$-\dot{n}_{4,C_2H_4O} + \xi_1 = 0$$

$$-\dot{n}_{4,C_2H_4O} + 85 \frac{\text{mol}}{\text{h}} = 0$$

$$\dot{n}_{4, \text{C}_2\text{H}_4\text{O}} = 85 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Ejemplo 1.8 Producción de Dietil Éter

El dietil éter o éter etílico es usado principalmente como solvente, aunque antiguamente se lo aplicaba como un anestésico pero debido a su alta inflamabilidad fue sustituido por otros productos. El proceso de producción viene regido por la siguiente reacción química:



Es posible obtener éter dietílico mediante la deshidratación de etanol en presencia de ácido sulfúrico, el proceso se detalla en la figura del ejemplo 1.8.1. Mediante la aplicación de balance de masa en el sistema, determine las composiciones y caudales necesarios para producir 2400 kg/h considerando una conversión de etanol del 95%.

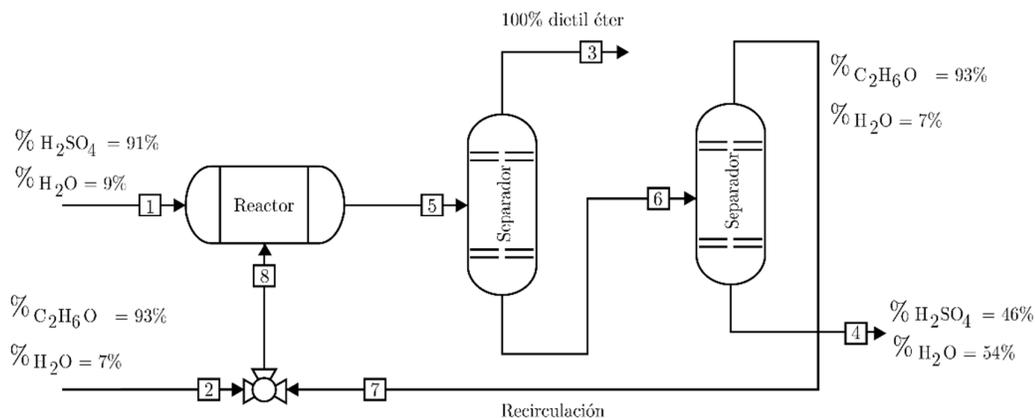


FIGURA DEL EJEMPLO 1.8.1

Diagrama del flujo del proceso de obtención de dietil éter

Solución

Transformación a flujo molar de dietil éter requerido como producto del proceso.

$$\dot{n}_3 = 2400 \frac{\text{kg dietil éter}}{\text{h}} \times \frac{1 \text{ kmol dietil éter}}{74 \text{ kg}} = 32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Determinación de las composiciones molares de las corrientes del sistema, debido a que, los valores presentados en el diagrama son composiciones másicas.

$$x_i = \frac{m_i \times \text{PM}_i}{m_i \times \text{PM}_i + m_j \times \text{PM}_j}$$

$$x_j = 1 - x_i$$

La corriente 1 está conformada por 91% de H_2SO_4 y 9% de H_2O en composiciones másicas, entonces:

$$91\% \text{ de } \text{H}_2\text{SO}_4 = 91 \text{ kg de } \text{H}_2\text{SO}_4$$

$$9\% \text{ de } \text{H}_2\text{O} = 9 \text{ kg de } \text{H}_2\text{O}$$

$$x_{\text{H}_2\text{SO}_4,1} = \frac{91 \text{ kg } \text{H}_2\text{SO}_4 \times \frac{1 \text{ kmol } \text{H}_2\text{SO}_4}{98 \text{ kg } \text{H}_2\text{SO}_4}}{91 \text{ kg } \text{H}_2\text{SO}_4 \times \frac{1 \text{ kmol } \text{H}_2\text{SO}_4}{98 \text{ kg } \text{H}_2\text{SO}_4} + 9 \text{ kg } \text{H}_2\text{O} \times \frac{1 \text{ kmol } \text{H}_2\text{O}}{18 \text{ kg } \text{H}_2\text{O}}}$$

$$x_{\text{H}_2\text{SO}_4,1} = 0.65$$

$$x_{\text{H}_2\text{O},1} = 1 - 0.65 = 0.35$$

La corriente 2 está conformada por 93% de $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ y 7% de H_2O en composiciones másicas, entonces:

$$93\% \text{ de } \text{C}_2\text{H}_6\text{O} = 93 \text{ kg de } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}$$

$$7\% \text{ de } \text{H}_2\text{O} = 7 \text{ kg de } \text{H}_2\text{O}$$

$$x_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O},2} = \frac{93 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_6\text{O} \times \frac{1 \text{ kmol } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}}{46 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}}}{93 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_6\text{O} \times \frac{1 \text{ kmol } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}}{46 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} + 7 \text{ kg } \text{H}_2\text{O} \times \frac{1 \text{ kmol } \text{H}_2\text{O}}{18 \text{ kg } \text{H}_2\text{O}}}$$

$$x_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O},2} = 0.84$$

$$x_{\text{H}_2\text{O},2} = 1 - 0.84 = 0.16$$

La corriente 4 está conformada por 46% de H_2SO_4 y 54% de H_2O en composiciones másicas, entonces:

$$46\% \text{ de } \text{H}_2\text{SO}_4 = 46 \text{ kg de } \text{H}_2\text{SO}_4$$

$$54\% \text{ de } \text{H}_2\text{O} = 54 \text{ kg de } \text{H}_2\text{O}$$

$$x_{\text{H}_2\text{SO}_4,4} = \frac{46 \text{ kg } \text{H}_2\text{SO}_4 \times \frac{1 \text{ kmol } \text{H}_2\text{SO}_4}{98 \text{ kg } \text{H}_2\text{SO}_4}}{46 \text{ kg } \text{H}_2\text{SO}_4 \times \frac{1 \text{ kmol } \text{H}_2\text{SO}_4}{98 \text{ kg } \text{H}_2\text{SO}_4} + 54 \text{ kg } \text{H}_2\text{O} \times \frac{1 \text{ kmol } \text{H}_2\text{O}}{18 \text{ kg } \text{H}_2\text{O}}}$$

$$x_{\text{H}_2\text{SO}_4,4} = 0.14$$

$$x_{\text{H}_2\text{O},4} = 1 - 0.14 = 0.86$$

La corriente 7 está conformada por 93% de $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ y 7% de H_2O en composiciones másicas, entonces:

$$93\% \text{ de } \text{C}_2\text{H}_6\text{O} = 93 \text{ kg de } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}$$

$$7\% \text{ de } \text{H}_2\text{O} = 7 \text{ kg de } \text{H}_2\text{O}$$

$$x_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O},7} = \frac{93 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_6\text{O} \times \frac{1 \text{ kmol } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}}{46 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}}}{93 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_6\text{O} \times \frac{1 \text{ kmol } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}}{46 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} + 7 \text{ kg } \text{H}_2\text{O} \times \frac{1 \text{ kmol } \text{H}_2\text{O}}{18 \text{ kg } \text{H}_2\text{O}}}$$

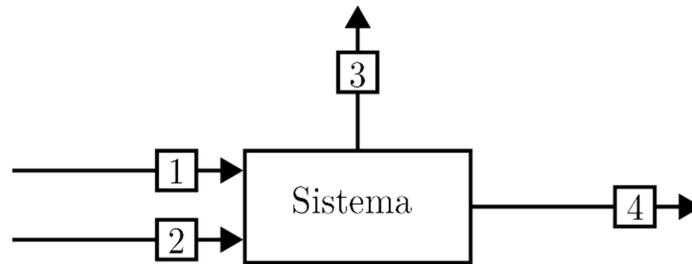
$$x_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O},7} = 0.86$$

$$x_{\text{H}_2\text{O},7} = 1 - 0.86 = 0.14$$

Balance global del sistema

$$E - S + G - C = A$$

$$E - S + \gamma_i \xi = 0$$



Balance de materia para el dietil éter

$$-\dot{n}_3 + \xi = 0$$

$$-32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + \xi = 0$$

$$\xi = 32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de materia para el etanol

$$x_{\text{C}_2\text{H}_5\text{O},2} \dot{n}_2 - 2\xi = 0$$

$$0.84 \dot{n}_2 - 2 \left(32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) = 0$$

$$\dot{n}_2 = 77.21 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de materia para el agua

$$x_{\text{H}_2\text{O},1} \dot{n}_1 + x_{\text{H}_2\text{O},2} \dot{n}_2 - x_{\text{H}_2\text{O},4} \dot{n}_4 + \xi = 0$$

$$0.35 \dot{n}_1 + 0.16 \times 77.21 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 0.86 \dot{n}_4 + 32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 0$$

$$0.35 \dot{n}_1 - 0.86 \dot{n}_4 = -44.78 \quad (\text{i})$$

Balance de materia para el ácido sulfúrico

$$x_{\text{H}_2\text{SO}_4,1} \dot{n}_1 - x_{\text{H}_2\text{SO}_4,4} \dot{n}_4 = 0$$

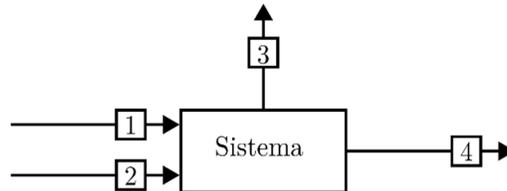
$$0.65 \dot{n}_1 - 0.14 \dot{n}_4 = 0 \quad (\text{ii})$$

Se presenta un sistema de ecuaciones con dos incógnitas, al resolverlas se determinan los siguientes valores.

$$\dot{n}_4 = 57.07 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_1 = 12.29 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de materia en el reactor



Balance de materia para el dietil éter

$$-\dot{n}_{5, \text{ dietil éter}} + \xi = 0$$

$$-\dot{n}_{5, \text{ dietil éter}} + 32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 0$$

$$\dot{n}_{5, \text{ dietil éter}} = 32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de materia para el etanol

$$\dot{n}_{8, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} - \dot{n}_{5, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} - 2\xi = 0$$

$$\dot{n}_{8, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} - \dot{n}_{5, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} - 2 \left(32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) = 0$$

$$\dot{n}_{8, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} - \dot{n}_{5, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} = 64.86 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Conversión del 95 % de etanol en el reactor

$$95 \% = \frac{\dot{n}_{8, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} - \dot{n}_{5, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}}}{\dot{n}_{8, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}}}$$

$$95 \% = 0.95 = \frac{64.86 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{\dot{n}_{8, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}}}$$

$$\dot{n}_{8, \text{C}_2\text{H}_6\text{O}} = 68.27 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{5,C_2H_6O} = 3.41 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de materia para el ácido sulfúrico

$$x_{H_2SO_4,1} \dot{n}_1 - \dot{n}_{5,H_2SO_4} = 0$$

$$0.65 \times 12.29 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - \dot{n}_{5,H_2SO_4} = 0$$

$$\dot{n}_{5,H_2SO_4} = 7.99 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{5,H_2SO_4} = \dot{n}_{6,H_2SO_4} = \dot{n}_{4,H_2SO_4}$$

Balance de materia en el segundo separador

$$E = S$$

Balance de materia para el etanol

$$\dot{n}_{6,C_2H_6O} = \dot{n}_{5,C_2H_6O} = 3.41 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{6,C_2H_6O} = x_{C_2H_6O} \dot{n}_7$$

$$3.41 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 0.86 \dot{n}_7$$

$$\dot{n}_7 = 3.97 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance de materia para el agua

$$\dot{n}_{6,H_2O} = \dot{n}_{7,H_2O} + \dot{n}_{4,H_2O}$$

$$\dot{n}_{6,H_2O} = x_{H_2O,7} \dot{n}_7 + x_{H_2O,4} \dot{n}_4$$

$$\dot{n}_{6,H_2O} = 0.14 \times 3.97 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 0.86 \times 57.07 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_{6,H_2O} = \dot{n}_{5,H_2O} = 49.64 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Valor del caudal la corriente 5

$$\dot{n}_5 = \dot{n}_{5,\text{H}_2\text{O}} + \dot{n}_{5,\text{H}_2\text{SO}_4} + \dot{n}_{5,\text{C}_2\text{H}_6\text{O}} + \dot{n}_{5, \text{ dietil éter}}$$

$$\dot{n}_5 = 49.64 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 7.99 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 3.41 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$\dot{n}_5 = 93.47 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Balance global de materia en el primer separador

$$\dot{n}_5 - \dot{n}_3 = \dot{n}_6$$

$$\dot{n}_6 = 93.47 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 32.43 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 61.04 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Valor del caudal de la corriente 8

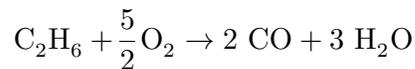
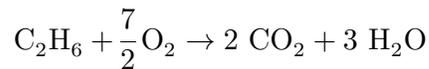
$$\dot{n}_8 = \dot{n}_2 + \dot{n}_7$$

$$\dot{n}_8 = 77.21 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} + 3.97 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 81.18 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Ejercicios Propuestos

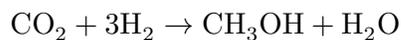
- A un reactor en estado estacionario encargado de generar acetaldehído, ingresa una alimentación de 100 kmol/min de una solución que contiene 70% mol de etanol, 30% agua y 80 kmol/min de aire conformado por 79% de nitrógeno y 21% de oxígeno. El acetaldehído se forman a partir de la reacción de etanol con oxígeno, luego este producto se oxida en ácido acético. Establezca ecuaciones químicas balanceadas; una principal y una secundaria. En función de la información proporcionada determine el valor de conversión que presenta el reactivo limitante que compuesto es el reactivo limitante. Considere que el reactivo limitante presenta una conversión ideal del 100% a una velocidad de generación de acetaldehído de 30 kmol/min y determine la conversión del reactivo en exceso.
- Un proceso de combustión de etano se desarrolla con un 50% de aire en exceso. Ingresan a un reactor de combustión 150 mol de etano y el aire en

exceso ($0.21 \frac{\text{mol O}_2}{\text{mol}}$ y $0.79 \frac{\text{mol N}_2}{\text{mol}}$), el porcentaje de conversión del etanol es de 93%; del etano que se quema un 25% reacciona para formar CO y el resto forma CO₂. Los productos de la combustión son agua, CO y CO₂, regidos por las reacciones:



Determine la composición molar de los gases producidos por la combustión.

- Un flujo de etileno puro de $1\,000 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ es alimentado al proceso de producción de etilenglicol. La relación de C₂H₄/O₂ en la alimentación inicial es de 2:1. Se purga la cantidad de $50 \frac{\text{gmol}}{\text{h}}$ CO₂ en el segundo absorbedor. La conversión fraccionaria del C₂H₄ en productos en el primer reactor es de 0.25. En el segundo reactor se alimenta agua dulce en una relación agua: C₂H₄O de 5:1. Por cada 10 moles de etilenglicol producido, se produce 1 mol de diglicol. Calcule la velocidad de la producción de C₂H₄O en el primer reactor, la composición y velocidad de flujo del gas que se purga, la velocidad de flujo de la corriente de recirculación al primer reactor y la velocidad de la producción de etilenglicol. ¿Qué fracción de etileno alimentado al proceso se convierte en el producto deseado? (Use el diagrama de flujo de la figura 1.5).
- La producción de metanol inicia con una alimentación fresca de hidrógeno, dióxido de carbono y un 0.3 % mol de sustancias inertes. En el reactor se produce la siguiente reacción:

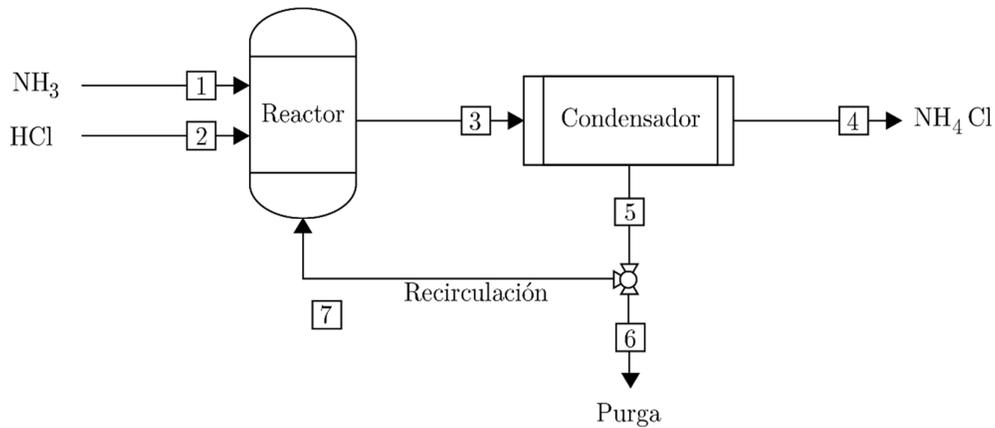


Los productos salientes del reactor se alimentan a un condensador que retira todo el metanol y agua del proceso, mientras que la otra corriente que contiene una parte de reactivos y las sustancias inertes es recirculado y se mezcla con la alimentación. Con el fin de evitar una acumulación en

el sistema se purga cierta cantidad de la corriente de recircula. La corriente que ingresa como alimentación al reactor (alimentación + recirculación) contiene 28% mol de dióxido de carbono, 70% mol de hidrógeno y 2% mol de sustancias inertes. El hidrógeno tiene una conversión del 65% en un solo paso. Determine los flujos y composiciones en la alimentación al reactor, en la corriente de recirculación, purga para producir 250 kmol/h de CH_3OH .

- En una planta de producción de formaldehído se producen 10 kmol/h. Cantidades de metano y oxígeno puro son alimentados al reactor a una temperatura de 200 °C estequiométricamente. Bajo estas condiciones el metano se transforma en un 25% formaldehído. Los gases salen del reactor a 300 °C cuando pasan por una torre que separa el formaldehído y el agua de los compuestos de oxígeno y el metano que no han reaccionado y se vuelve a calentar a la temperatura del reactor para ser recirculados al proceso. Calcule todos los flujos molares de cada corriente.
- En la industria petroquímica preparamos reacciones químicas para modificar las especies y crear nuevos materiales, el cloruro de amonio es un producto petroquímico usado en la industria textil, fertilizante y de alfarería, para su obtención se combina amoniaco con ácido clorhídrico en un reactor con una relación molar de 8:1, ambos con una pureza de 98% convirtiendo el 80% del amoniaco que entra en cloruro de amonio. Para evitar un gasto adicional en el proceso, se coloca una purga para que el reciclo del ácido clorhídrico no supere el 5% en peso. Determinar cada uno de los caudales y composiciones de todas las corrientes involucradas en el proceso sabiendo que al reactor ingresan 100kg/h de amoníaco.

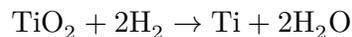




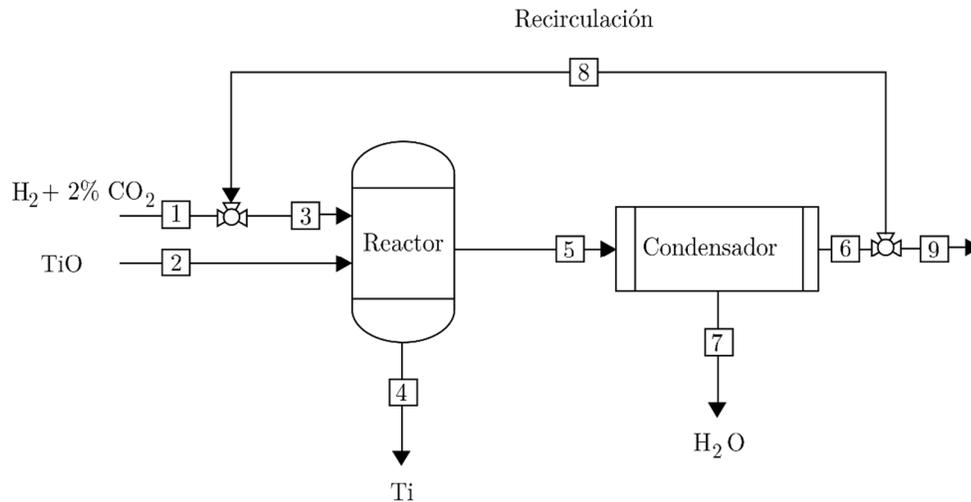
- El sorbitol es un endulzante y colorante utilizado en la industria alimenticia, la reacción de producción de sorbitol se lleva a cabo en un reactor de hidrogenación catalítica, la alimentación al reactor es equimolar y en régimen permante. Determine la velocidad de flujo total a la salida de el reactor.



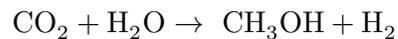
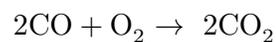
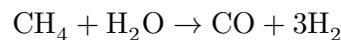
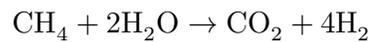
- El dióxido de titanio es un pigmento ampliamente utilizado para la elaboración de pintura blanca, cuando a este compuesto se lo reduce completamente con hidrógeno produce titano según la reacción.



De acuerdo al diagrama de flujo que se proporciona, el óxido (2) y el hidrógeno (1) entran por separado en el reactor debido a que el H_2 contiene un 2% de dióxido de carbono como impureza, del reactor emerge titanio y el resto de los componentes en fase gas, con la ayuda de un condensador se realiza la separación del agua que resulta de la reacción, después se recicla una gran parte de la corriente gaseosa (9), purgando las impurezas. Si se desea obtener 4% molar de CO_2 en la corriente 3 ¿Cuál sera la composición de la purga , si la relación molar de recirculación a la alimentación es de 5/1?



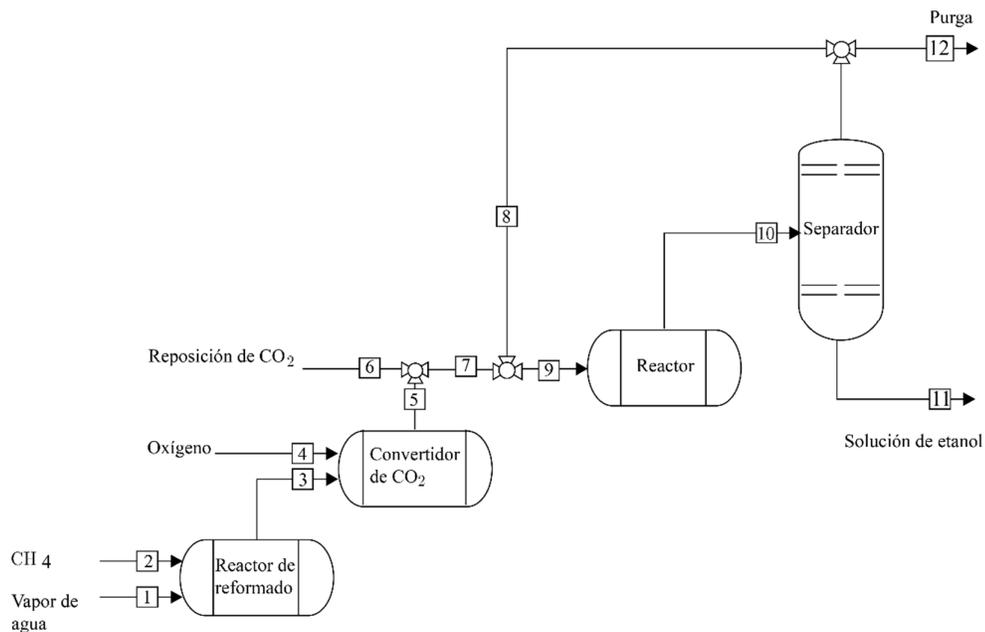
- El metanol es un alcohol ampliamente utilizado en la industria petroquímica para la elaboración de combustibles y anticongelantes, el diagrama de flujo presentado muestra un proceso de síntesis de metanol, en donde el metano alimentado contiene un 2% de nitrógeno que debe purgarse con el fin de evitar la acumulación en el sistema. En este proceso interviene las siguientes reacciones.



La alimentación consiste en vapor de agua con un 12% en exceso con relación a la reacción 1, la conversión de metano es del 95% con un rendimiento del 80% de CO_2 .

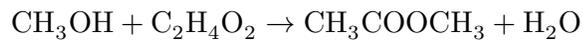
Para el reactor que produce metanol la conversión es del 40% en un solo paso, el convertidor de monóxido de carbono tiene un alimentación estequiométrica con una conversión de CO del 100% , seguidamente se añade CO_2 con el objetivo de tener una relación de hidrógeno-dióxido de

carbono de 2 a 1, el efluente del reactor condensa todo el metanol y agua, los productos no condensables son reciclados a la alimentación del reactor para lograr una relación entre hidrógeno-dióxido de carbono de 3 a 1. Determinar las moles de hidrógeno que se pierden en la purga, los moles de dióxido de carbono de reposición, la cantidad de metanol producido y su concentración en % peso, sabiendo que en la corriente de purgado contiene 4% de nitrógeno.

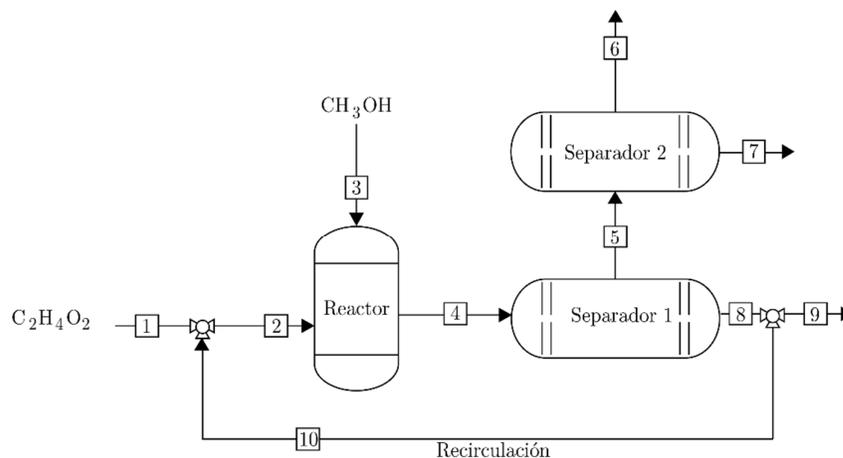


- A un reactor que opera en régimen permante se alimentan 500 kg/h de clorato de sodio, 200 kg/h de ácido sulfúrico y 100 kg/h de metanol, donde sus conversiones son 33%, 48% y 60% respectivamente. Si el reactor descarga dióxido de cloro, bisulfato de sodio, monóxido de carbono y agua, determine la ecuación química, las composiciones y flujo de la corriente de descarga del reactor.
- El éster de vinagre o acetato de metilo es conocido como el disolvente universal en la rama artística, se puede obtener haciendo reaccionar un exceso metanol con ácido acético, el diagrama de proceso se describe en la

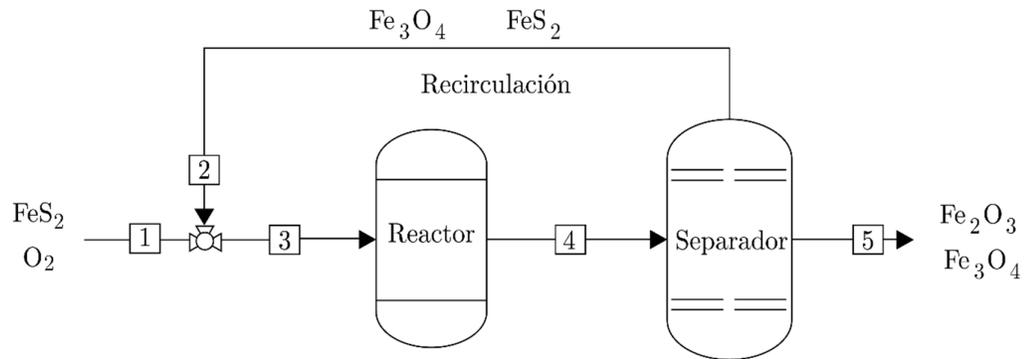
imagen adjunta, metanol y ácido acético ingresan con una relación molar de 3:1.



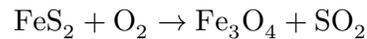
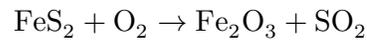
En primera instancia se combina 100 mol/h de ácido acético con una disolución acuosa de ácido acético con 4% molar de agua en el reactor perfectamente agitado en donde se estima una conversión del 50% del reactivo limitante, después ingresan a un primer separador en donde se separa el 75% del agua producida junto con los demás productos de la reacción y todo el ácido acético es separado para ser recirculado al reactor. Finalmente, en un segundo separador en donde se obtiene una corriente con el 80% molar de éster de vinagre con metanol que sale por la corriente 6 y una disolución acuosa de metanol por la corriente 7.



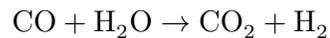
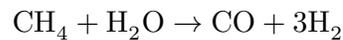
- El dióxido de azufre se produce al hacer reaccionar oxígeno con piritita, además se obtienen como productos adicionales el óxido de azufre, óxido ferroso y férrico, el proceso se lleva a cabo como se muestra en el diagrama de flujo.



La alimentación del proceso se ve influenciada por una corriente de recirculación proveniente del separador, tal que la alimentación al reactor tiene una relación molar pirita-oxígeno de 2/1. Determinar las composiciones de las corrientes asumiendo una producción de 90 moles de dióxido de azufre por hora.



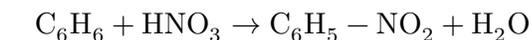
- La reacción de reformado del metano con vapor de agua con una molécula de agua y la reacción de desplazamiento de gas de agua se presenta a continuación



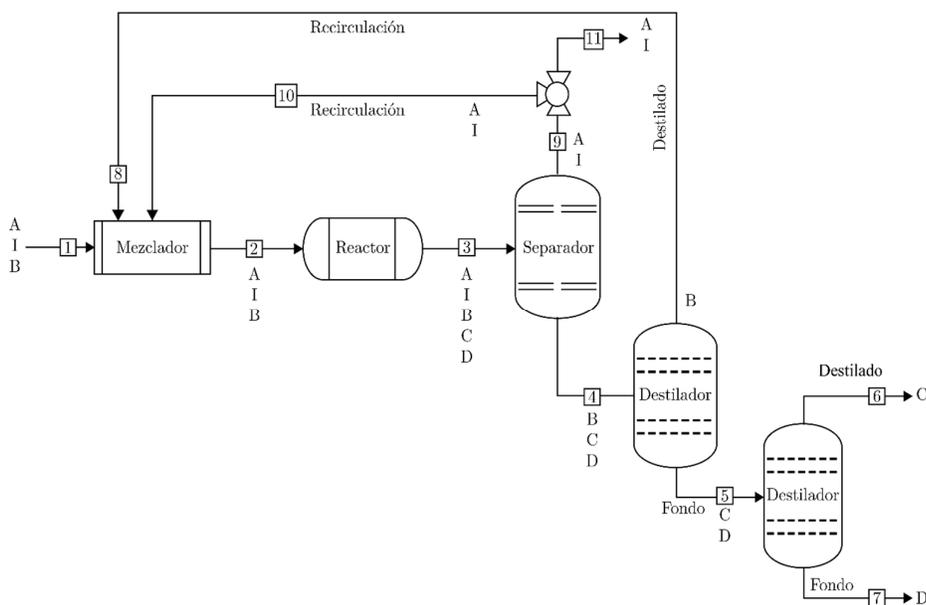
Las dos reacciones tienen lugar en el primer reactor y en el segundo solo transcurre la primera reacción, las condiciones empleadas para el proceso establecen que, si al segundo reactor ingresan 15 moles de un gas reductor el cual contiene 25% H₂, 70% N₂, 5% H₂O, por cada mol de producto que sale del reactor se obtiene 90% molar de CO₂ y 10% de CO. La corriente gaseosa resultante ingresa al primer reactor como reciclo, se obtiene una corriente con el 10% molar de CO, determinar las composiciones de cada

corriente, si la purga es del 10% de la corriente que sale del primer reactor y el condensador logra que la fracción molar de agua sea del 0.6%.

- Determinar los flujos y composiciones para del siguiente diagrama de flujo, la alimentación de 85% mol de C_6H_6 (A), 15% mol de propano que actúa como inerte (I) y ácido nítrico (B), las reacciones involucradas ocurren simultáneamente y producen $C_6H_5 - NO_2$ (C) y $C_6H_4 - (NO_2)_2$ (D)



Las condiciones de reacción establecen que el 68% de (A) y el 70% de (B) alimentados al reactor se convierten en productos, los productos de reacción se envían a un separador donde una corriente gaseosa que contiene (A) e (I) en la parte superior de la columna de destilación y en la parte inferior una corriente líquida constituida por (B), (C) y (D). Una fracción de la corriente gaseosa es purgada y el reciclo se mezcla con la corriente de alimentación. La corriente líquida que sale del reactor se recupera y reciclan separando (C) y (D). Dato adicional: La velocidad de producción de (C) es de 30 mol/s.



Referencias

- Delgado Linares, J. G., Delgado Linares, G. A., & Mercado Ojeda, R. A. (2009). Balances de masa y energía simplificados, aplicados a un proceso de craqueo catalítico de petróleo. *Educación Química*, 20(4), 456–460. [https://doi.org/10.1016/s0187-893x\(18\)30050-8](https://doi.org/10.1016/s0187-893x(18)30050-8)
- Ghasem, N., & Henda, R. (2014). *Principles of chemical engineering processes: Material and energy balances*. CRC Press. <https://doi.org/10.1201/b17696>
- Gooding Gavarito, N. (2009). *Balance de materia: Para ingenieros químicos* (Séptima). UNAL.
- Himmelblau David. (1997). *Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química* (6ta ed.). University of Texas.
- Izquierdo J. , Costa J., Martínez de la Ossa E., Rodríguez J., M. I. (2011). *Introducción a la Ingeniería Química: Problemas resueltos de balances de materia y energía*. Editorial Reverté.
- Matar, S., & Hatch, L. (1995). *Chemistry of petrochemical processes* (2da ed., Issue 345). McGraw-Hill
- Murphy, R. M. (2007). *Introducción a los procesos químicos: principios, análisis y síntesis*. (2da ed.). McGraw-Hill.

2

Sistemas Monofásicos Aplicados a la Química y Petroquímica

El desarrollo de procesos de balance de materia, aplicados al campo de la química y afines depende de las propiedades físicas del material de interés; varias de estas propiedades se han obtenido mediante mediciones experimentales, estas son usualmente usadas para derivar y relacionar nuevas propiedades. Un sistema monofásico se considera una condición de uniformidad de todos los componentes de un proceso, pero, a pesar de que la condición se cumpla, no significa que se presente un equilibrio al final; sino más bien que cada componente tiene propiedades físicas y químicas independientes entre sí, la variación de la temperatura y presión modifica las propiedades de las sustancias sólida y líquidas levemente.

Objetivos de Aprendizaje

- Comprender y aplicar los conceptos relacionados a la obtención de propiedades físicas, como: fluidos incompresibles, ecuaciones de estado Soave–Redlich–Kwong (SRK), virial y comportamiento ideal.
- Determinar las composiciones de una mezcla expresada en composiciones molares, fracciones volumétricas o másicas, dadas las presiones parciales de cada componente de una mezcla de gas ideal.
- Resolver problemas de procesos en una sola fase de gases con comportamiento ideal o real.

2.1 Propiedades Físicas de una Sustancia

A menudo, el análisis de procesos monofásicos requiere valores sobre algunas propiedades físicas de la sustancia, muchas veces estas propiedades se pueden encontrar en información bibliográfica, a pesar de ello, en otras ocasiones es necesario obtener valores con mayor precisión de las que se encuentran en estas fuentes; para esto, es necesario poder determinar dichos valores. Estas propiedades físicas son la densidad, la presión, la entalpía, el volumen, etc.

2.1.1 Densidades de Líquidos y Sólidos

La densidad se define como la propiedad física intensiva de una sustancia o material. Se determina mediante la relación de la cantidad de masa (m) con la unidad de volumen (V) que ocupa un material. Una propiedad física puede medirse sin cambiar la identidad de la sustancia. En el sistema internacional la masa se mide en kg, y el volumen tiene las unidades de m^3 , a su vez en unidades recíprocas en otros sistemas de medidas. La densidad se simboliza mediante la letra rho (ρ) del alfabeto griego.

$$\text{densidad} = \frac{\text{masa}}{\text{volumen}} = \frac{m}{V} \quad (2.1)$$

Cuando se modifica la temperatura a materiales líquidos o sólidos, estos se expanden o encogen presentando cambios modestos, pero relevantes, por otro lado, la densidad es independiente de las variaciones de presión, debido a que los líquidos y sólidos se denominan sustancias incompresibles. Por esta razón, se puede asumir volúmenes de aditivos al mezclar líquidos.

$$V = \sum V_i \quad (2.2)$$

donde (V) es el volumen total de la mezcla y (V_i) es el volumen de cada componente de la mezcla de líquidos similares. Los líquidos pueden presentar fuerzas de atracción o repulsión, de modo que el volumen ocupado por la mezcla

puede ser mayor o menor que la suma de los volúmenes individuales de cada líquido. La densidad de una mezcla puede calcularse de forma aproximada promediando los volúmenes específicos, proceso conocido como la regla aditiva de volumen:

$$\frac{1}{\rho} = \sum \frac{x_i}{\rho_i} \quad (2.3)$$

donde, (ρ) es la densidad total de la mezcla, (x_i) representa a la fracción del componente i y (ρ_i) es la densidad del componente i .

$$\frac{1}{\rho} = \sum \frac{w_i}{\rho_i} \quad (2.4)$$

donde, (ρ) es la densidad total de la mezcla, (w_i) representa a la masa del componente i y (ρ_i) es la densidad del componente i .

O simplemente se podría obtener el promedio de las densidades de los componentes puros en relación a la fracción másica que representa en la mezcla total.

$$\rho = \sum x_i \rho_i \quad (2.5)$$

A pesar de que los métodos presentados son bastante similares, las ecuaciones pueden llegar a presentar valores más cercanos a los datos experimentales; dependiendo del parecido de las estructuras moleculares que tienen los líquidos que conforman las mezclas.

Entonces la manera más sencilla de determinar la densidad de una mezcla de líquidos o la solución de un sólido disuelto en líquidos es en base a datos experimentales. El Perry's Chemical Engineers' Handbook presenta un listado de densidades del agua y el mercurio, además incluye datos experimentales para la determinación de la densidad de líquidos orgánicos, inorgánicos y soluciones acuosas inorgánicas a 1 atm de presión. También presentan valores de densidad de soluciones orgánicas acuosas.

Ejemplo 2.1 Cálculo de la densidad de una solución de ácido sulfúrico.

Mediante el uso de una tabla bibliográfica de propiedades físicas de compuestos puros. Calcule la densidad de una solución acuosa de H_2SO_4 al 40% en peso en g/cm^3 y suponga aditividad del volumen de los componentes de la solución.

Solución

El dato experimental de la densidad a condiciones de 25°C y 1 atm, para una solución acuosa de H_2SO_4 al 40% en peso que proporciona el Manual de Perry es: $1.2991 \text{ g}/\text{cm}^3$.

Suponiendo la propiedad aditiva, se debe obtener los valores individuales tabulados en el Perry's Chemical Engineers' Handbook de cada componente puro que conforma la mezcla (H_2O y H_2SO_4).

$$\rho(\text{H}_2\text{SO}_4 \text{ a } 25^\circ\text{C}) = 1.8205 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

$$\rho(\text{H}_2\text{O} \text{ a } 25^\circ\text{C}) = 0.997 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

La composición en peso del ácido sulfúrico es del 40% por diferencia la composición del agua es 60%, ahora, para determinar la densidad de la mezcla se usa la ecuación 2.3.

$$\frac{1}{\rho} = \sum \frac{x_i}{\rho_i}$$

$$\frac{1}{\rho} = \left(\frac{x_{\text{H}_2\text{SO}_4}}{\rho_{\text{H}_2\text{SO}_4}} \right) + \left(\frac{x_{\text{H}_2\text{O}}}{\rho_{\text{H}_2\text{O}}} \right)$$

$$\frac{1}{\rho} = \left(\frac{0.4}{1.8205 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}} \right) + \left(\frac{0.6}{0.997 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}} \right)$$

$$\rho = 1.217 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

El error de estimación de los cálculos se puede determinar por la diferencia de los valores de densidad obtenidos.

$$\frac{\left(1.2991 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} - 1.217 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}\right)}{1.217 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}} \times 100 = 6.74 \%$$

2.2 Gases Ideales

Un gas ideal es una consideración hipotética alrededor de sus características moleculares, por ejemplo un gas ideal ocupará siempre el mismo volumen sin depender la temperatura y presión, además las fuerzas de repulsión o atracción de estos gases es inexistente, por tanto no presentan choques intermoleculares evitando un cambio en la naturaleza de fase. Para determinar las propiedades físicas como la densidad o volumen específico de un gas ideal, es necesario considerar a condiciones de presión y temperatura a diferencia de los líquidos y sólidos.

2.2.1 Ecuación de Estado de Gases Ideales

Una ecuación de estado considera a la cantidad molar y el volumen que tiene un gas a una presión y temperatura determinada y viene dada de a forma:

$$PV = nRT \quad (2.6)$$

$$P\dot{V} = \dot{n}RT \quad (2.7)$$

Donde, (P) es la presión absoluta del gas, (V) volumen del gas (\dot{V}) velocidad de flujo volumétrico, (n) número de moles del gas (\dot{n}) velocidad de flujo molar, (R) constante de los gases y (T) temperatura del gas.

La ecuación de estado de gases ideales también se puede escribir como:

$$P\hat{V} = RT \quad (2.8)$$

Siendo \widehat{V} (\dot{V}/\dot{n} o V/n) el volumen específico del gas.

Para aplicar la ecuación de estado y afirmar que en 1 mol de gas ideal a 0°C y 1 atmósfera ocupa 22.415 litros, no es necesario reconocer a la especie, es decir puede ser N_2 , O_2 , mezclas, aire. La constante de los gases ideales R , se toma en relación con las unidades a las que se encuentren las demás propiedades, como se presenta en el apéndice A.1.

En el momento de usar la ecuación de estado se ha considerado valores de presión y temperatura; menor y cercana a 1 atm y mayores a 0 °C respectivamente, sin embargo al manejar otras condiciones se pueden generar errores, para evitarlos es necesario saber cuándo usar la ecuación de estado de gases ideales, para ello se usa la siguiente expresión:

$$\epsilon = \frac{A_{\text{ideal}} - A_{\text{verdadera}}}{A_{\text{verdadera}}} \times 100 \% \quad (2.9)$$

donde A_{ideal} es el valor obtenido aplicando la ecuación de estado de los gases ideales y ϵ es el error en el valor estimado. Si el error que presenta es menor al 1% es aceptable cuando el volumen molar específico ($\widehat{V}_{\text{ideal}} = \frac{RT}{P}$) presenta los valores:

$\epsilon < 1\%$ si $\widehat{V}_{\text{ideal}} = \frac{RT}{P} > 5 \frac{L}{\text{mol}}$, en gases diatómicos, ej. N_2 , O_2 , etc.

$\epsilon < 1\%$ si $\widehat{V}_{\text{ideal}} = \frac{RT}{P} > 20 \frac{L}{\text{mol}}$, en otros gases.

Ejemplo 2.2 Volumen de Etano en Condiciones Estándar

Con la finalidad de obtener energía, se aplica el proceso de degradación anaerobia biológica de la materia orgánica en ausencia de oxígeno, la descomposición de la materia genera gases o biogás como el C_2H_6 y mínimas cantidades de CO_2 , H_2 , H_2S , etc. Calcule el volumen, en metros cúbicos, ocupado por 500 kg de etano (C_2H_6) en condiciones

estándar, considerando una temperatura de 273,15 K y una presión absoluta de 100 kPa.

Solución

Las condiciones estándar T, P y \hat{V} de los gases ideales en el sistema internacional SI son 273.15 K, 101.325 kPa y 22.4 m³/lbmol respectivamente.

$$500 \text{ kg C}_2\text{H}_6 \times \frac{1 \text{ kmol C}_2\text{H}_6}{30 \text{ kg C}_2\text{H}_6} \times \frac{22.42 \text{ m}^3 \text{ C}_2\text{H}_6}{\text{kmol CH}_4}$$

$$= 373.67 \text{ m}^3 \text{ a condiciones estándar}$$

Ejemplo 2.3 Aplicación de la Ecuación de Estado en un Gas con Comportamiento Ideal

Un recipiente contiene 100 gramos de oxígeno a 40 °C y 3 atm. Calcule el volumen en litros que ocupa suponiendo un comportamiento ideal del gas.

Solución

La ecuación de gases ideales, relaciona al flujo molar de un gas con la temperatura y presión, este problema indica una masa de 150 g de oxígeno.

$$150 \text{ g O}_2 \times \frac{1 \text{ mol de O}_2}{32 \text{ g O}_2} = 4.688 \text{ mol de O}_2$$

Por medio del uso de la ecuación 2.6, referente a gases ideales se despeja el valor del volumen y se usa la constante universal de gases R que se encuentre con unidades convenientes para la simplificación de unidades:

$$PV = nRT$$

$$V = \frac{nRT}{P}$$

$$V = \frac{(4.688 \text{ mol O}_2) \left(0.082 \frac{\text{atm L}}{\text{mol K}}\right) (40 \text{ }^\circ\text{C} + 273)\text{K}}{3 \text{ atm}}$$

$$V = 40.11 \text{ L}$$

2.2.2 Temperatura y Presión Estándar

Los cálculos para la determinación de las variables de temperatura y presión, dadas en la ecuación de estado de gases ideales son directos, pero el conocimiento de los valores de la constante universal de gases R en varias magnitudes es una forma de evitar hacer una conversión a partir de condiciones estándar, sin embargo, también es posible aplicar este método a partir de los valores estándar de temperatura y presión. Un gas ideal presenta P y T arbitrarias o propios de la mezcla o sustancia pura.

Para el mismo gas, se puede considerar valores de temperatura y presión de referencia, denominados como condiciones estándar, y se representan como:

$$P_s \widehat{V}_s = RT_s \quad (2.10)$$

donde, ($T_s = 0 \text{ }^\circ\text{C}$) es la temperatura estándar, ($P_s = 1 \text{ atm}$) es la presión estándar, (R) es la constante universal de gases y ($\widehat{V}_s = 22.4 \text{ L/mol}$) es el volumen molar específico estándar. El dividir estas ecuaciones se obtiene una expresión que evita el uso de la constante universal de gases R .

$$\frac{PV}{P_s \widehat{V}_s} = n \frac{T}{T_s} \quad (2.11)$$

Para corrientes que fluyen se pueden considerar \dot{n} y \dot{V} que reemplazarían a n y V de la ecuación (2.11).

Ejemplo 2.4 Constante Universal de Gases.

Determine el valor de la constante universal de gases que presente las siguientes unidades: temperatura en K, presión en atm y el volumen en cm^3 . Considere que el cálculo se lo hace para un mol de gas ideal.

Solución

Para resolver este problema se debe usar la ecuación 2.6 y despejar a la constante universal de gases.

$$PV = nRT$$

$$R = \frac{PV}{nT}$$

$$R = \frac{(1 \text{ atm})(22.4 \text{ cm}^3)}{(1 \text{ mol})(273.15 \text{ K})} = 0,082 \frac{\text{atm cm}^3}{\text{mol K}}$$

Ejemplo 2.5 Flujo Volumétrico de un Gas de Comportamiento Ideal

Calcule la velocidad de flujo volumétrico a partir de las condiciones estándar de una corriente de propano (C_3H_8) que sale a 1500 kg/h de un reactor a temperatura de 400 °C y 5 atm.

Solución

Se inicia con la conversión del flujo másico a flujo molar de la corriente de propano.

$$\dot{n} = 1500 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \text{ de } \text{C}_3\text{H}_8 \times \frac{1 \text{ kmol } \text{C}_3\text{H}_8}{44 \text{ kg de } \text{C}_3\text{H}_8} = 34.09 \frac{\text{kmol } \text{C}_3\text{H}_8}{\text{h}}$$

$$\frac{P\dot{V}}{P_s \widehat{V}_s} = \dot{n} \frac{T}{T_s}$$

$$\dot{V} = \dot{n} \hat{V}_s \times \frac{T}{T_s} \times \frac{P_s}{P}$$

$$\dot{V} = 34.09 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \times \frac{22.4 \text{ m}^3}{\text{kmol}} \times \frac{(400 + 273.15)\text{K}}{273.15 \text{ K}} \times \frac{1 \text{ atm}}{5 \text{ atm}} = 376.37 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$$

Ejemplo 2.6 Cambios en la Velocidad de Flujo Volumétrico por Efecto de la Temperatura y Presión.

Se busca alimentar aire a un reactor de combustión con el fin de asegurar una reacción completa, para ello se requiere calentar 40 ft³ de aire de 530 R y 1 atmósfera hasta 1070 R y 2 atm. Realice los cálculos necesarios que le permitan determinar si el volumen que ocupa el aire luego de ser calentado será mayor o menor que a condiciones iniciales.

Solución

Hay que establecer las ecuaciones de gas ideal para las condiciones inicial y final.

Aire a condiciones iniciales.

$$P_1 V_1 = nRT_1 \quad (\text{i})$$

$$P_1 = 1 \text{ atm}$$

$$V_1 = 40 \text{ ft}^3$$

$$T_1 = 530 \text{ }^\circ\text{R}$$

Aire a condiciones finales

$$P_2 V_2 = nRT_2 \quad (\text{ii})$$

$$P_2 = 2 \text{ atm}$$

$$V_2 = ?$$

$$T_2 = 1070 \text{ }^\circ\text{R}$$

Los valores de la constante universal de gases R y las moles del aire no se modifican entre el estado inicial y final, es decir, $n_1 = n_2$.

Al despejar la velocidad de flujo volumétrico en condiciones finales y relacionar las ecuaciones (i) y (ii) se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{P_2 V_2}{P_1 V_1} = \frac{T_2}{T_1}$$

$$V_2 = V_1 \left(\frac{P_1}{P_2} \right) \left(\frac{T_2}{T_1} \right)$$

$$V_2 = 40 \text{ ft}^3 \left(\frac{1 \text{ atm}}{2 \text{ atm}} \right) \left(\frac{1070 \text{ }^\circ\text{R}}{530 \text{ }^\circ\text{R}} \right) = 40.377 \text{ ft}^3$$

2.2.3 Densidad de un Gas

La densidad de un gas básicamente se define como la masa total por unidad de volumen y se expresa en unidades de kilogramos por metro cúbico, libras por pie cúbico, u otras unidades equivalentes.

$$\rho = \frac{M}{\widehat{V}} = \frac{m}{V}$$

donde, (ρ) es la densidad, (M) es el peso molecular de la especie y (\widehat{V}) es el volumen específico de la especie.

Ejemplo 2.7 Densidad del Nitrógeno

El nitrógeno gaseoso tiene varias aplicaciones debido a sus propiedades no reactivas; a menudo se usa en procesos reactivos exotérmicos con el fin de retirar el calor excesivo generado por la reacción o simplemente es usado como gas de purga. Determine la densidad del gas nitrógeno en unidades del sistema internacional SI cuando el nitrógeno se encuentra a 325 K y 1.3 atm de presión.

Solución

Para determinar la densidad se deben considerar los valores de temperatura y presión estándar

$$\frac{P\widehat{V}}{P_s\widehat{V}_s} = \frac{T}{T_s}$$

$$\widehat{V} = \widehat{V}_s \times \frac{T}{T_s} \times \frac{P_s}{P}$$

$$\widehat{V} = 22.4 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}} \times \frac{325 \text{ K}}{273.15 \text{ K}} \times \frac{100 \text{ kPa}}{131.72 \text{ kPa}} = 20.234 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}}$$

Para determinar el valor de densidad necesitamos dividir una cantidad de masa de nitrógeno para el volumen molar.

Hay que considerar el peso molecular que presenta un kmol de nitrógeno.

$$\rho = \frac{\text{PM}}{\widehat{V}} = \frac{\frac{28 \text{ kg de N}_2}{1 \text{ kmol N}_2}}{20.234 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}}} = 1.384 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

Ejemplo 2.8 Determinación de la Gravedad Específica del Nitrógeno.

Un medidor electrónico es usado con 1 ft³ de nitrógeno para determinar la gravedad específica del gas nitrógeno a 500 R y 0.89 bar con el propósito de controlar la combustión de un proceso que tiene 1 ft³ de aire a las mismas condiciones de T y P. Obtenga y compare la gravedad específica en ambos casos.

Solución

El nitrógeno en estado gaseoso y el aire se encuentran a 500 R y 0.89 bares de presión con un volumen de 1 ft³ cada uno. Inicialmente hay

que encontrar los valores de densidad de cada gas, entonces, se deben considerar los valores de temperatura y presión estándar.

$$\frac{P\widehat{V}}{P_s\widehat{V}_s} = \frac{T}{T_s}$$

$$\widehat{V} = \widehat{V}_s \times \frac{T}{T_s} \times \frac{P_s}{P}$$

La densidad de un gas se calcula por la siguiente expresión:

$$\rho = \frac{PM}{\widehat{V}}$$

$$\rho_{N_2} = \frac{PM_{N_2}}{\widehat{V}_s \times \frac{T}{T_s} \times \frac{P_s}{P}}$$

$$\rho_{N_2} = \frac{28 \frac{\text{lb}}{\text{lbmol}}}{359 \frac{\text{ft}^3}{\text{lbmol}} \times \frac{500 \text{ R}}{492 \text{ R}} \times \frac{1 \text{ bar}}{0.89 \text{ bar}}} = 0.068 \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}$$

$$\rho_{\text{aire}} = \frac{PM_{\text{aire}}}{\widehat{V}_s \times \frac{T}{T_s} \times \frac{P_s}{P}}$$

$$\rho_{\text{aire}} = \frac{28.8 \frac{\text{lb}}{\text{lbmol}}}{359 \frac{\text{ft}^3}{\text{lbmol}} \times \frac{500 \text{ R}}{492 \text{ R}} \times \frac{1 \text{ bar}}{0.89 \text{ bar}}} = 0.07 \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}$$

La gravedad específica del nitrógeno es igual a su densidad dividida para la densidad del aire a las mismas condiciones:

$$Ge = \frac{0.068 \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}}{0.07 \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}} = 0.971$$

2.3 Gases Reales

Por facilidad de análisis se puede dar por sentado que los gases se comportan de forma ideal. No obstante, en condiciones de alta presión los valores de las propiedades del gas que idealmente, podría obtener usando la ley de los gases

ideales variarían extensamente en relación con los datos experimentales. Normalmente, las moléculas de un gas interactúan entre sí, concluyendo que todos los gases reales no son ideales. A pesar de que la ecuación de estado de un gas ideal pueda aproximar los valores de las propiedades de un gas a baja presión y alta temperatura, o viceversa el efecto de las relaciones intermoleculares modifica la conducta de los gases.

2.3.1 Temperaturas y Presiones Críticas

La exactitud del uso de la ecuación de estado para los gases depende de la temperatura y presión del sistema. Se habla de una temperatura crítica cuando se encuentra sobre el límite a la que un gas no puede ser licuado por compresión, en otras palabras es la temperatura a la cual una sustancia puede coexistir en dos fases y presenta una presión crítica en la sustancia, además cuando, tanto la P y T llegan al estado crítico; el comportamiento de la sustancias llega a asemejarse con la de un gas ideal.

Los términos vapor y gas son usados en ocasiones de forma errónea, no obstante, hay que saber que una sustancia se encuentra en su estado de vapor cuando se ubica con valores por debajo de la temperatura crítica, por otro lado, se ubicará en el estado gas cuando esta supera a su temperatura crítica a una presión bastante baja. El vapor puede llegar a condensarse manteniendo un sistema isotérmico y aumentando la presión, mientras que el gas a pesar de ser comprimido no puede separarse en dos fases. Además la temperatura crítica es la temperatura máxima en donde una especie puede coexistir en dos fases (líquido-vapor).

2.3.2 Ecuaciones de Estado para Gases No Ideales o Reales

La mayoría de los gases no son gases ideales y usar la ecuación de estado de gases ideales para estos casos generaría cálculos inexactos, a estos gases se los denomina gases reales o no ideales, y usan nuevas ecuaciones de estado como:

- a) Factor de compresibilidad.
- b) Virial.
- c) Van der Waals.
- d) Soave–Redlich–Kwong (SRK).
- e) Regla de Kay, para mezclas de gases no ideales.

2.3.2.1 Ecuación de Estado del Factor de Compresibilidad (z)

Se puede modificar la ecuación de estado de gases ideales insertando un coeficiente que compense la no idealidad de los gases con el fin de obtener una ecuación de estado para gases reales. Este coeficiente se llama factor de compresibilidad y se representa con la letra z . Cuando el valor del factor es igual a la unidad significa que el gas es ideal, mientras menor sea el comportamiento ideal se presentarán valores entre 1 y 0. A continuación se presentan la ecuación de estado del factor de compresibilidad para corrientes de gas que fluyen y corrientes fijas.

$$PV = znRT \quad (2.12 \text{ a})$$

$$P\hat{V} = zRT \quad (2.12 \text{ b})$$

$$P\dot{V} = znRT \quad (2.12 \text{ c})$$

La aplicación de la ley de estado modificada en función de un factor de compresibilidad es práctico y con regularidad este factor suele encontrarse en gráficas obtenidas en base a datos experimentales en función de la presión reducida a la que se encuentra el gas, como se muestra en la figura 2.1. De acuerdo con el enfoque simple de estados correspondientes (abarca dos parámetros T , P), todos los fluidos obedecen a la misma ecuación de estado cuando sus propiedades se encuentran escritas en forma reducida:

$$\frac{z}{z_c} = f\left(\frac{T}{T_c}, \frac{P}{P_c}\right) \quad (2.13)$$

$$z_r = f(T_r, P_r) \quad (2.14)$$

donde, (z_c) es el factor de compresibilidad crítica y tiende a ser casi un dato constante para especies orgánicas con un valor aproximado de 0.27, esto genera que la expresión más empleada sea:

$$z = f(T_r, P_r) \quad (2.15)$$

donde, (T_r) es la temperatura reducida y (P_r) es la presión reducida de gas. Algunos valores del factor de compresibilidad se encuentran tabulados. Apéndice A.3. Cuando el volumen molar del gas es conocido, se usa:

$$V_r = V_r^{\text{ideal}} = \frac{V}{\left(\frac{RT_c}{P_c}\right)} \quad (2.16)$$

Es posible extender la ecuación de estado correspondiente a tres parámetros como la presión, temperatura y un factor acéntrico de Pitzer (ω) específico del compuesto; dicho factor se encuentran en la tabla 2.1 o en su defecto en el apéndice A.3. Y la ecuación queda expresada como se muestra a continuación:

$$z = f(T_r, P_r, \omega) \quad (2.17)$$

Se dispone de datos tabulados experimentales que permiten encontrar el valor del factor (z) mediante el uso de expresiones como:

$$z = \frac{PV}{RT} \quad (2.18)$$

Siendo (P) la presión, (V) es el volumen molar, (R) es la constante del gas, y (T) es la temperatura absoluta. Para las unidades utilizadas en estas tablas, R debe ser usado con un valor de 0.008314472 MPa dm³/(mol K). Mediante el método gráfico también es posible determinar el valor del factor de compresibilidad.

2.3.2.1.1 Gráficas de Compresibilidad

Normalmente, cada gas presenta diferentes valores de factor de compresibilidad pese de trabajar con las mismas consideraciones de P y T, por ello, es necesario considerar medir por separado este factor en función de la temperatura y la presión de cada especie; existen ecuaciones de estado como la de Van der Waals y SRK que fueron desarrolladas para facilitar este proceso.

A continuación se presenta los pasos a seguir para poder estimar el factor (z) que se basa en la ley de los estados correspondientes que menciona que el factor de compresibilidad va a depender de la proximidad del gas a su estado crítico. Cuando la temperatura reducida (T_r) y la presión reducida (P_r), tienen un valor más próximo a la unidad significa que se encuentra más cerca de su estado crítico.

- a. Determinar la temperatura crítica (T_c) y la presión crítica (P_c), del gas a tratar en tablas bibliográficas. Apéndice A.2
- b. Con el uso de las siguientes relaciones, se debe calcular la temperatura reducida (T_r) y la presión reducida (P_r).

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (2.19)$$

$$P_r = \frac{P}{P_c} \quad (2.20)$$

- c. Entonces para cada valor que presente la temperatura reducida (T_r), se obtiene un valor para el factor z versus el valor de presión reducida (P_r) en la gráfica general de compresibilidad.

La figura 2.1 muestra una gráfica de compresibilidad general para fluidos con (z) factor de compresibilidad. A pesar de que la gráfica puede ser usada para gases y líquidos, es preciso enfocarse en el comportamiento de un gas ideal, cuando la presión reducida es cercana a 1, es decir más se aproximan a las presiones críticas,

debido a que el factor de compresibilidad depende de la proximidad del gas a su estado crítico.

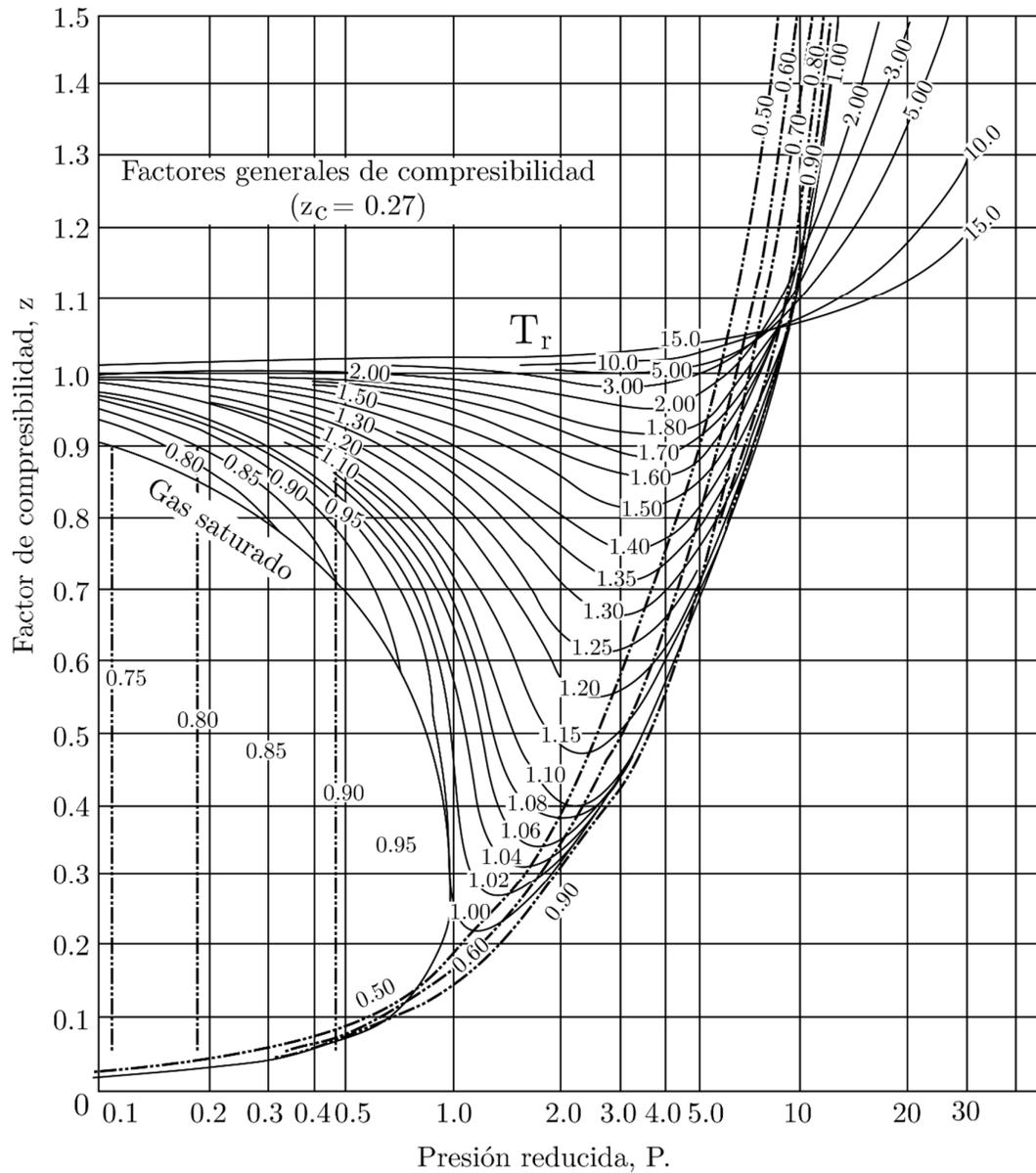


FIGURA 2.1.

Gráfica general de compresibilidad para fluidos con factor de compresibilidad crítico. (Tomado de Chemical Process Principles Charts, 2ª edición, por O. A. Hougen, K. M. Watson y R. A. Ragatz, John Wiley & Sons, New York).

Las figuras 2.2 a 2.4 son expansiones de la figura 1, que introducen al parámetro V_r^{ideal} para evitar los cálculos de prueba y error donde no se sabe el valor de la presión o temperatura.

$$V_r^{\text{ideal}} = \frac{\widehat{V}}{\widehat{V}_c^{\text{ideal}}} = \frac{\widehat{V}}{RT_c/P_c} = \frac{P_c \widehat{V}}{RT_c} \quad (2.21)$$

Para hacer uso correcto de la gráfica general de compresibilidad enfocada a cálculos PVT, se debe considerar el siguiente procedimiento.

1. Calcular o encontrar en datos experimentales la presión y temperatura crítica de la sustancia.
2. Si se trata de los gases hidrógeno o helio se debe calcular las constantes críticas con las correlaciones de Newton que se muestran a continuación.

$$T_c^a = T_c + 8K$$

$$P_c^a = P_c + 8\text{atm}$$

3. Mediante las siguientes expresiones, calcule los valores reducidos de temperatura y presión, temperatura y volumen o presión y volumen.

$$T_r = \frac{T}{T_c}$$

$$P_r = \frac{P}{P_c}$$

$$V_r^{\text{ideal}} = \frac{P_c \widehat{V}}{RT_c}$$

4. Utilizar las gráficas de las figuras 2.1, 2.2, 2.3, y 2.4 para calcular el factor de compresibilidad (z) para despejar el valor desconocido de la ecuación (2.12) o sus variantes con flujos.

Para esto si se usa la gráfica general de compresibilidad no se va a tener resultados tan exactos por eso es recomendable utilizar la ecuación de estado de constantes múltiples para PVT en condiciones alejadas de lo ideal

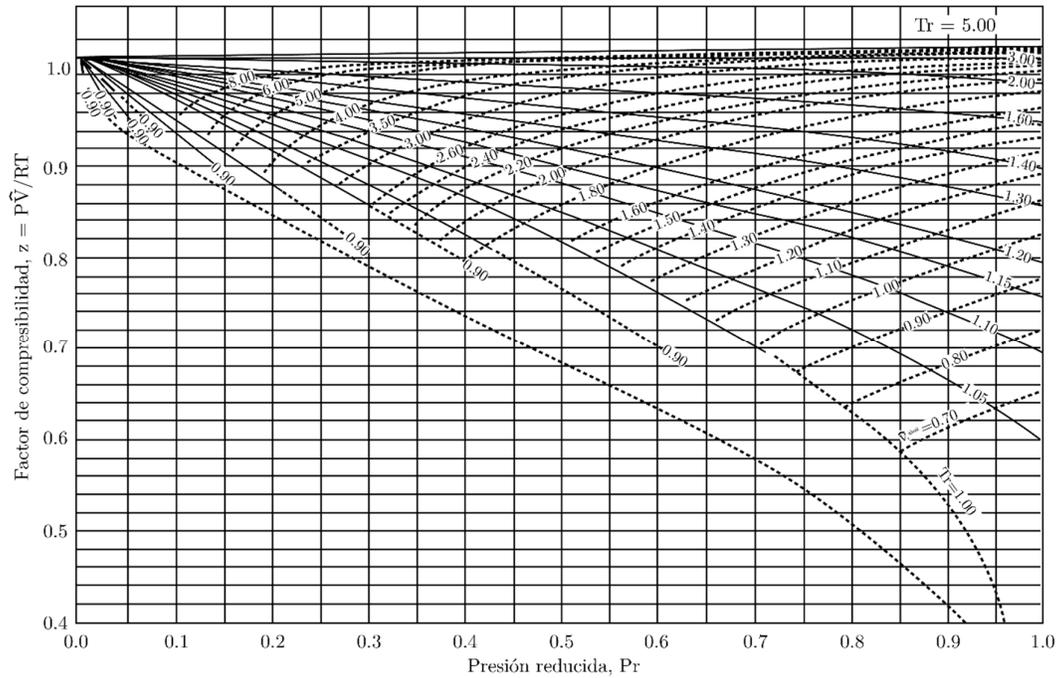


FIGURA 2.2.

Gráfica general de compresibilidad a bajas presiones. (Tomado de D.M. Himmelblau, Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, 6ª edición.1997, p.286)

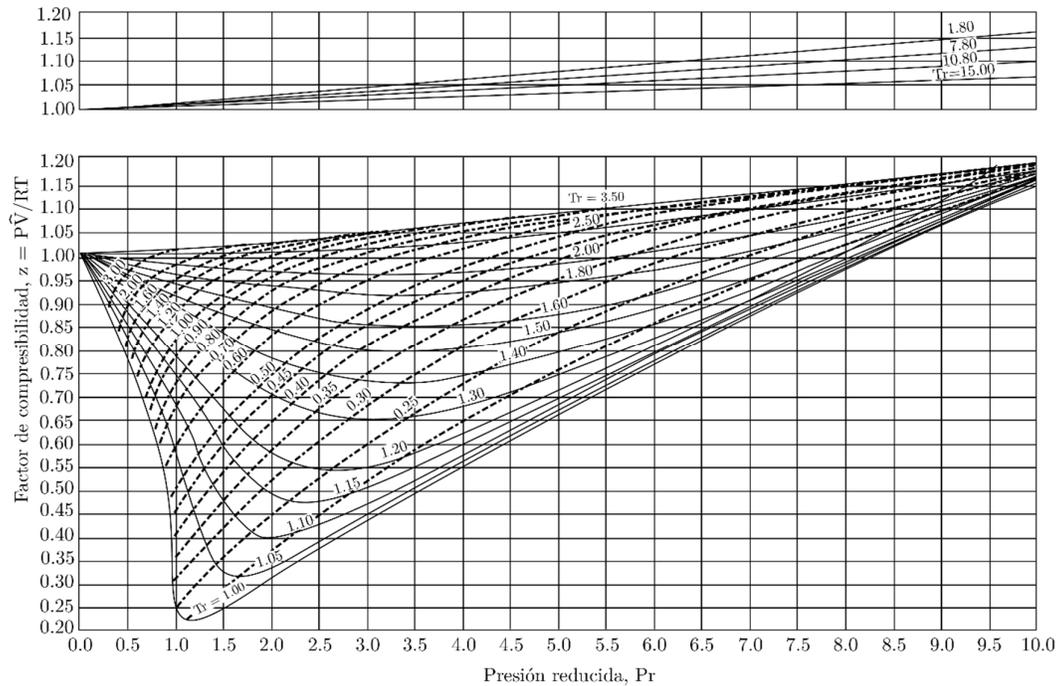


FIGURA 2.3.

Gráfica general de compresibilidad para presiones medias. (Tomado de D.M. Himmelblau, Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, 6ª edición.1997, p.286.)

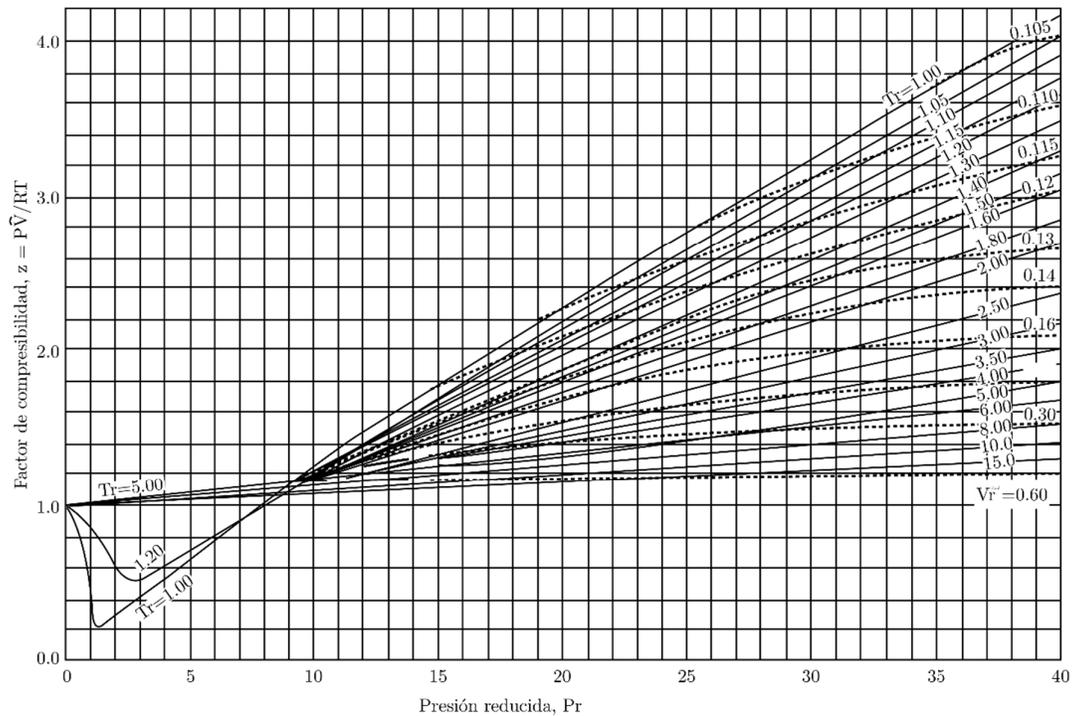


FIGURA 2.4.

Gráfica general de compresibilidad para presiones altas. (Tomado de D.M. Himmelblau, Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, 6ª edición.1997, p.287.)

Ejemplo 2.9 Cálculo del Factor de Compresibilidad

Una muestra de cloro gaseoso se encuentra a 26 atm y una temperatura de 38 K, determine el factor de compresibilidad considerando los valores críticos de 33 K (T_c) y 13 atm (P_c).

Solución

Es preciso considerar la gráfica general de compresibilidad del factor de compresibilidad (z).

$$T_r = \frac{T}{T_c} = \frac{38 \text{ K}}{33 \text{ K}} = 1.15$$

$$P_r = \frac{P}{P_c} = \frac{26}{13} = 0.5$$

De la figura 2.1, se obtiene el valor de 0.88 para el factor de compresibilidad.

Ejemplo 2.10 Cálculo del Factor de Compresibilidad

100 moles de nitrógeno está contenido en un recipiente de 7 litros a -30°C . Mediante cálculos y con ayuda de la gráfica general de compresibilidad determine la presión total del cilindro.

Datos adicionales; la presión crítica del nitrógeno es 33.5 atm mientras que la temperatura crítica es 126.2 K.

Solución

Inicialmente es necesario determinar los valores de volumen y temperatura reducidos.

$$V_r^{\text{ideal}} = \frac{(33.5 \text{ atm}) \times (15 \text{ L})}{(100 \text{ mol}) \times (0.08206 \frac{\text{L atm}}{\text{mol K}}) \times (126.2 \text{ K})} = 0.485$$

Para determinar la temperatura reducida, es necesario (2.19)

$$T_r = \frac{T}{T_c} = \frac{(-30^{\circ}\text{C} + 273)\text{K}}{126.2 \text{ K}} = 1.925$$

A partir de los valores de V_r^{ideal} y T_r se usan la figura 2.3 de compresibilidad a presiones intermedias, obteniendo un factor de compresibilidad de 0.96.

$$\widehat{V} = \frac{15 \text{ L}}{100 \text{ mol}} = 0.15 \frac{\text{L}}{\text{mol}}$$

$$P = \frac{zRT}{\widehat{V}} = \frac{0.96 \times 0.08206 \frac{\text{atm L}}{\text{K mol}} \times (-30 + 273)\text{K}}{0.15 \frac{\text{L}}{\text{mol}}}$$

$$P = 127.57 \text{ atm}$$

2.3.2.2 Ecuación Virial de Estado

La ecuación virial de estado es una serie infinita de potencias del inverso de volumen específico molar

$$z = \frac{P\widehat{V}_m}{RT} = 1 + \frac{B}{\widehat{V}_m} + \frac{C}{\widehat{V}_m^2} + \frac{D}{\widehat{V}_m^3} + \dots \quad (2.22)$$

B, C, D son conocidos como coeficientes viriales en función de la temperatura. Los coeficientes se obtienen por medio de la mecánica estadística; en la actualidad no se tienen métodos exactos para estimar los coeficientes viriales, sin embargo el único coeficiente más aproximado que se puede obtener es el B , por medio de las siguientes correlaciones:

$$B_0 = 0.083 - \frac{0.422}{T_r^{1.6}} \quad (2.23)$$

$$B_1 = 0.139 - \frac{0.172}{T_r^{4.2}} \quad (2.24)$$

$$B = \frac{RT_c}{P_c} (B_0 + \omega B_1) \quad (2.25)$$

donde, (T_c) es la temperatura crítica, (P_c) es la presión crítica, (T_r) es la temperatura reducida, esta última puede calcularse por la siguiente relación $T_r = \frac{T}{T_c}$, aunque algunos valores de la temperatura crítica se pueden encontrar en tablas con valores experimentales, y (ω) es el factor acéntrico de Pitzer, algunos factores de compuestos de uso común se pueden encontrar en la siguiente tabla.

TABLA 2.1

Factores acéntricos de Pitzer

Nombre del compuesto	ω
Agua	0.344
Amoniaco	0.25
Cloro	0.073
Dióxido de azufre	0.251
Dióxido de carbono	0.225
Etano	0.098
Metano	0.008
Metanol	0.559
Monóxido de carbono	0.049
Nitrógeno	0.040
Oxígeno	0.021
Sulfuro de hidrógeno	0.1

Nota: La tabla completa se puede encontrar en el apéndice A.3 del capítulo. (Tomado de R. C. Reid, J. M. Prausnitz, y B. E. Poling, The Properties of Gases and liquids, 4a. edición, McGraw-Hill, Nueva York.)

Ejemplo 2.11 Estimación de la Presión del Nitrógeno

Determine la presión dentro de un recipiente de 10 L aplicando la ecuación virial de estado hasta un segundo término de aproximación. El recipiente contiene 5 moles de benceno a $-200\text{ }^{\circ}\text{C}$. Datos adicionales: la temperatura crítica del benceno es 562.6 K, y su presión crítica es 48.6 atm.

Solución

Se debe iniciar determinando la T_r del benceno, luego hay que usar las ecuaciones 2.23, 2.24 y 2.25 para calcular la presión del recipiente.

$$T_r = \frac{T}{T_c} = \frac{(-200^\circ\text{C} + 273)\text{K}}{562.6 \text{ K}} = 0.130$$

Para el primer valor de aproximación:

$$B_0 = 0.083 - \frac{0.422}{0.130^{1.6}} = -10.95$$

El segundo valor de aproximación:

$$B_1 = 0.139 - \frac{0.172}{0.130^{4.2}} = -905.52$$

Del apéndice A.3, se toma el valor de 0.2103 como factor acéntrico de Pitzer del benceno.

$$B = \frac{RT_c}{P_c} (B_0 + \omega B_1)$$

$$B = \frac{\left(0.08205 \frac{\text{atm L}}{\text{K mol}}\right) (562.6 \text{ K})}{48.6 \text{ atm}} (-10.95 + 0.2103 \times -905.52)$$

$$B = -191.28 \frac{\text{L}}{\text{mol}}$$

$$P = \frac{RT}{\widehat{V}_m} \left(1 + \frac{B}{\widehat{V}_m}\right)$$

$$P = \frac{0.08205 \frac{\text{atm L}}{\text{mol K}} (-200 + 273)\text{K}}{\frac{10 \text{ L}}{5 \text{ mol}}} \left(1 + \frac{-191.28 \frac{\text{L}}{\text{mol}}}{2 \frac{\text{L}}{\text{mol}}}\right)$$

$$P = -283.43 \text{ atm.}$$

2.3.2.3 Ecuación de estado Van Der Waals

La ecuación de van der Waals es la primera expresión de las ecuaciones cúbicas de estado que relaciona a PVT para analizar el comportamiento no ideal de un gas mediante la siguiente expresión:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2} \quad (2.26)$$

Esta expresión usa dos parámetros que no dependen de la temperatura pero varían de un gas a otro. En el denominador el parámetro (b) representa el volumen que ocupa una molécula de gas real, este valor es restado del (V_m) volumen molar total disponible del recipiente que contiene al gas. A medida que el volumen molar aumente, el factor de compresibilidad se aproxima a 1, es decir, tiende a tener un comportamiento ideal. El segundo parámetro, (a) expresa la interacción molecular.

Ambos parámetros son expresados en términos de temperatura y presión crítica como se muestra a continuación.

$$a = \frac{27 R^2 T_c^2}{64 P_c} \quad (2.27)$$

$$b = \frac{R T_c}{8 P_c} \quad (2.28)$$

Ejemplo 2.12 Ecuación de Estado Van der Waals

El dióxido de carbono es usado para mejorar el rendimiento de la pulpa para fabricar papel. Cuando el dióxido de carbono es transportado en camiones desde un sitio A a un sitio B, este debe soportar condiciones ambientales inesperadas como el aumento de presión en el cilindro debido al calor del sol. Un cilindro de 0.23 m^3 que contiene 25 kg de CO_2 la presión es medida con un manómetro en un día soleado,

arrojando un valor de 4500 kPa. Mediante el uso de la ecuación de estado de van der Waals, determine la temperatura a la que se encuentra el dióxido de carbono en el cilindro.

Datos adicionales: La temperatura crítica y la presión crítica del dióxido de carbono son 304.2 K y 72.9 atm respectivamente. El factor acéntrico del CO₂ puede ser obtenido de la tabla 2.1 con un valor de 0.225.

Solución

Determinar el valor de los parámetros a y b.

$$a = \frac{27 R^2 T_c^2}{64 P_c} = \frac{27 \left(0.082026 \frac{\text{atm L}}{\text{mol K}}\right)^2 (304.2 \text{ K})^2}{64 (72.9 \text{ atm})} = 3.603 \text{ atm} \left(\frac{\text{L}}{\text{mol}}\right)^2$$

$$b = \frac{RT_c}{8 P_c} = \frac{0.082026 \frac{\text{atm L}}{\text{mol K}} (304.2 \text{ K})}{8 (72.9 \text{ atm})} = 0.0428 \frac{\text{L}}{\text{mol}}$$

A partir de la ecuación (2.26) se puede obtener el valor de la temperatura, considerando la masa que se encuentra dentro del cilindro.

$$v = 0.23 \text{ m}^3 \times \frac{1000 \text{ L}}{1 \text{ m}^3} = 230 \text{ L}$$

$$n = 25 \text{ kg de CO}_2 \times \frac{1 \text{ kmol CO}_2}{44 \text{ kg de CO}_2} \times \frac{1000 \text{ mol}}{1 \text{ kmol}} = 568 \text{ mol}$$

La presión a la que aumenta el cilindro, se considera una presión manométrica, por tanto:

$$P_{\text{total}} = P_{\text{atmosférica}} + P_{\text{manométrica}}$$

Reemplazar los datos y transformar unidades

$$P_{\text{total}} = (4500 \text{ kPa} + 101 \text{ kPa}) \times \frac{1 \text{ atm}}{101.32 \text{ kPa}} = 45.41 \text{ atm}$$

Ahora la ecuación (2.26) se reescribe en función del número de moles n y el volumen, obteniendo la siguiente expresión:

$$\left\{ P + \left(\frac{n^2 a}{V^2} \right) \right\} (V - nb) = nRT$$

Reemplazar los datos en la ecuación reescrita.

$$\begin{aligned} & \left\{ 45.41 \text{ atm} + \left(\frac{(568 \text{ mol})^2 \times 3.603 \text{ atm} \left(\frac{\text{L}}{\text{mol}} \right)^2}{(230 \text{ L})^2} \right) \right\} (230 \text{ L} \\ & \quad - 568 \text{ mol} \times 0.0428 \frac{\text{L}}{\text{mol}}) \\ & = 568 \text{ mol} \times 0.082026 \frac{\text{atm L}}{\text{mol K}} \times T \\ & T = 297.49 \text{ K} \end{aligned}$$

2.3.2.4 Ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK)

Otra expresión de las ecuaciones cúbicas es la ecuación de estado SRK, es una ecuación empírica que se utiliza para describir un sistema, relaciona presiones, temperaturas y volumen de gases.

La ecuación es:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{\alpha a}{V_m(V_m + b)} \quad (2.29)$$

Los factores a , b y α se pueden estimar con las siguientes correlaciones

$$a = 0.42747 \frac{(RT_C)^2}{P_C} \quad (2.30)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_C}{P_C} \quad (2.31)$$

$$\alpha = [1 + m(1 - \sqrt{T_r})]^2 \quad (2.32)$$

$$m = 0.48508 + 1.5517\omega - 0.1561\omega^2 \quad (2.33)$$

$$T_r = \frac{T}{T_C}$$

Ejemplo 2.13 Ecuación de Estado SRK

Un recipiente que contiene cloro se encuentra a una temperatura de 35°C con un volumen molar de 0.4 m³/kmol. Calcular mediante el uso de la ecuación SRK la presión a la cual el cloro se encuentra en el recipiente.

Solución

Para determinar la presión del gas por la ecuación de estado SRK, se deben conocer las constantes críticas del cloro, obtenidos del apéndice A.2.

$$T_C = 417.15 \text{ K}$$

$$P_C = 7.71 \times 10^3 \text{ kPa}$$

Adicionalmente es necesario conocer el factor acéntrico de la tabla 2.1 del elemento cloro; $\omega = 0.073$.

$$a = 0.42747 \frac{(RT_C)^2}{P_C}$$

$$a = 0.42747 \frac{\left[\left(8.314 \frac{\text{kPa m}^3}{\text{kmol K}} \right) (417.15 \text{ K}) \right]^2}{7.71 \times 10^3 \text{ kPa}}$$

$$a = 666.89 \frac{\text{kPa m}^6}{\text{kmol}^2}$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_C}{P_C}$$

$$b = 0.08664 \frac{\left(8.314 \frac{\text{kPa m}^3}{\text{kmol K}} \right) (417.15 \text{ K})}{7.71 \times 10^3 \text{ kPa}}$$

$$b = 0.0389 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}}$$

$$m = 0.48508 + 1.5517\omega - 0.1561\omega^2$$

$$m = 0.48508 + 1.5517(0.0688) - 0.1561(0.0688)^2$$

$$m = 0.59$$

$$T_r = \frac{T}{T_C}$$

$$T_r = \frac{308.15 \text{ K}}{417.15 \text{ K}}$$

$$T_r = 0.739$$

$$\alpha = [1 + m(1 - \sqrt{T_r})]^2$$

$$\alpha = [1 + (0.59)(1 - \sqrt{0.739})]^2$$

$$\alpha = 1.172$$

Reemplazar los parámetros en la ecuación SRK.

$$P = \frac{RT}{V_m b} - \frac{\alpha a}{V_m(V_m + b)}$$

$$P = \frac{\left(8.314 \frac{\text{kPa m}^3}{\text{kmol K}}\right) (308.15 \text{ K})}{0.4 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}} - 0.0389 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}}} - \frac{(1.172) \left(666.89 \frac{\text{kPa m}^6}{\text{kmol}^2}\right)}{\left(0.4 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}}\right) \left(0.4 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}} + 0.0389 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}}\right)}$$

$$P = 2642.86 \text{ kPa}$$

2.3.2.5 Mezcla de gases no ideales (La regla de Kay)

La manera de interpretar el comportamiento de un gas no ideal aumenta su grado de complejidad cuando se habla de mezclas, esto a pesar de contar con métodos de correlaciones gráficas o analíticas como los métodos analizados anteriormente. Sin embargo, para resolver este conflicto existe un método llamado la regla de Kay que usa promedios de las propiedades pseudocríticas de las mezclas, es decir

trabaja principalmente con la presión y temperatura críticas de cada componentes que conforme la mezcla, las propiedades pseudocríticas permiten determinar a las propiedades pseudorreducidas, como se observó en los métodos pasados.

Las propiedades pseudocríticas están representadas por:

Temperatura pseudocrítica

$$T'_c = \sum y_i T_{c_i} \quad (2.34)$$

Presión pseudocrítica

$$P'_c = \sum y_i P_{c_i} \quad (2.35)$$

donde (y_i) es la fracción molar de una especie i que se encuentre en la mezcla.

Las propiedades pseudorreducidas vienen dadas por:

Temperatura pseudorreducida

$$T'_r = \frac{T}{T'_c} \quad (2.36)$$

Presión pseudorreducida

$$P'_r = \frac{P}{P'_c} \quad (2.37)$$

Los valores de presión y temperaturas pseudocríticas y pseudorreducidas, son usados en las gráficas generalizadas para determinar el factor de compresibilidad.

La expresión para una mezcla no ideal se comporta igual que para un fluido puro.

$$P \widehat{V} = z_m R T \quad (2.38)$$

Ejemplo 2.14 La regla de Kay

El GLP (gas licuado de petróleo) se utiliza principalmente como combustible y en la rama de petroquímica actualmente es una materia prima importante para la producción de olefinas y aromáticos por medio de una reacción catalítica. Un tanque a 820 atm y 350°C contiene una mezcla gaseosa con composición molar de 60% propano y 40% butano. Empleando la regla de Kay, determine el volumen específico de la mezcla.

Solución

Para la resolución de este ejercicio se obtienen los valores de las condiciones pseudocríticas de temperatura y presión de cada componente del apéndice A.2

Para el propano (A)

$$T_{CA} = 369.83 \text{ K}$$

$$P_{CA} = 4.248 \text{ MPa}$$

Para el butano (B)

$$T_{CB} = 425.12 \text{ K}$$

$$P_{CB} = 3.796 \text{ MPa}$$

Identificar las fracciones molares de la mezcla.

$$y_A = 0.6; \quad y_B = 0.4$$

Determinar las propiedades pseudocríticas:

Temperatura pseudocrítica

$$T'_c = \sum y_i T_{c_i}$$

$$T'_c = y_A T_{c_A} + y_B T_{c_B}$$

$$T'_c = (0.6)(369.83 \text{ K}) + (0.4)(425.12 \text{ K})$$

$$T'_c = 391.946 \text{ K}$$

Presión pseudocrítica

$$P'_c = \sum y_i P_{c_i}$$

$$P'_c = y_A P_{c_A} + y_B P_{c_B}$$

$$P'_c = (0.6)(4.248 \text{ MPa}) + (0.4)(3.796 \text{ MPa})$$

$$P'_c = 4.0888 \text{ MPa} = 40.35 \text{ atm}$$

Determinar las propiedades pseudorreducidas:

Temperatura pseudorreducida

$$T'_r = \frac{T}{T'_c}$$

$$T'_r = \frac{350 \text{ }^\circ\text{C} + 273.15}{391.946 \text{ K}}$$

$$T'_r = 1.589$$

Presión pseudorreducida

$$P'_r = \frac{P}{P'_c}$$

$$P'_r = \frac{820 \text{ atm}}{40.35 \text{ atm}}$$

$$P'_r = 20.32$$

A partir de las condiciones pseudorreducidas, es posible obtener por el método gráfico usando el diagrama general de compresibilidad de la figura 2.4. Donde se obtiene un factor de compresibilidad de $z = 1.94$

Calcular el volumen específico

$$P \hat{V} = Z_m R T$$

$$\hat{V} = \frac{Z_m R T}{P}$$

$$\hat{V} = \frac{1.94 \left(0.082 \frac{\text{atm L}}{\text{mol K}} \right) (350 + 273.15) \text{K}}{820 \text{ atm}}$$

$$\hat{V} = 0.058 \frac{\text{L}}{\text{mol}}$$

Ejercicios Propuestos

- Existen dos tipos de gas natural, el asociado que se encuentra en el petróleo crudo y el no asociado que no tiene contacto con el petróleo, es decir se ubica en pozos secos. El principal componente del gas natural es el metano y en fracciones más pequeñas se encuentran los hidrocarburos C2-C7; el gas natural no asociado tiene mayor cantidad de metano que el gas asociado, por otro lado el gas asociado tiene más hidrocarburos que el gas no asociado. Se debe considerar que las composiciones de los gases varían de un yacimiento a otro. Se ha tomado una muestra a una temperatura de 300K y una presión de 80 atm de un gas natural no asociado, esta muestra presenta los siguientes valores de composiciones molares:

Componente	y_i
C_1	0.86
C_2	0.05
C_3	0.05
C_4	0.02
C_5	0.01

C_6	0.005
C_7	0.005

Determinar el volumen específico del gas natural no asociado, mediante la aplicación de la regla de Kay.

- Un tanque de 5 m^3 contiene 2 kmol de helio. Estime la presión del gas en atmosferas utilizando la ecuación de estado SRK a una temperatura de 250K.
- Un cilindro contiene gas etano a una temperatura de 320K. Empleando la ecuación de estado SRK determine la velocidad de flujo volumétrico si el gas se encuentra a las presiones de 1, 8 y 80 atmosferas. Luego compare los resultados obtenidos con la ecuación de estado de gases ideales y mencione a que presión el gas tiene a comportarse como gas ideal.
- En una planta petroquímica a escala dentro de un laboratorio, se dispone de un tanque sobre una balanza, en el cual ingresa 60% en peso de n-pentano y n-octano en estado líquido. Un estudiante que se encuentra completando sus horas de pasantías dentro de este establecimiento, apunta los valores de la masa registrada por la balanza para posteriormente graficarlos en función del tiempo, la gráfica que obtenida presenta tendencia lineal y el estudiante debe determinar ciertas propiedades físicas en los puntos determinados a 3 y 10 minutos, obteniendo los valores de masa de 200kg y 350kg respectivamente, determinar:
 - a) El flujo volumétrico de la mezcla.
 - b) El peso del tanque cuando está vacío.
- Un estudio realizado a los gases producidos dentro de un reactor de combustión busca determinar el volumen molar y la densidad del dióxido de carbono en $\frac{\text{L}}{\text{mol}}$ y $\frac{\text{g}}{\text{L}}$, considerando que es un gas ideal y se encuentra a una presión de 4 atm.

- Una muestra de 2 gramos-mol de cloruro de etilo va a ser empleado en la fabricación de un aerosol anestésico usado en deportistas, se encuentra en forma de vapor a 102 °C y 8 atm. Se desea establecer la variación de las propiedades del gas, cuando es considerado como ideal o real.
 - a) Mediante la ecuación del gas ideal estimen el volumen total del sistema.
 - b) Calcule el porcentaje de error si se supone que el volumen real es de 2.5 litros y el gas sigue un comportamiento ideal.
- Un tanque que contiene oxígeno presenta una presión manométrica medida a 25°C por un manómetro indica un valor de 5 bar, sabiendo que el volumen del tanque es de 22.0 m³. Considerando los siguientes apartados estime la masa del oxígeno:
 - a) Tomando como método de solución la ecuación de gases ideales.
 - b) A partir de las condiciones estándar calcular la conversión
- Tomando en cuenta las condiciones estándar determine el valor que posee la constante de los gases, R en las siguientes unidades y compárelas con los valores proporcionados en el apéndice A.1.
 - a) atm × L/kmol × K
 - b) mmHg × in³/lbmol × R
- Se tiene nitrógeno a condiciones estándar de temperatura y presión en un contenedor de gas, donde la masa de nitrógeno es de 38.25 g. Dentro del mismo contenedor se tiene monóxido de carbono a TPE donde la masa es de 38.40 g. Si el contenedor se llena de un gas desconocido a TPE esta pesa 38.02 g. Determine el peso molecular y la probable identidad del gas desconocido.
- A una velocidad de 12 kg/s el aire con composición de 79 mol% de N₂ y el resto de O₂ se mezcla con otra corriente que contiene CO. Esta nueva corriente ingresará a una mezcladora a 145 °C, 23 m³/s y

1.2 bar. Determinar el porcentaje en base molar de la corriente de CO como producto.

- Determine la velocidad de flujo del aire que se necesita en condiciones estándar para un gas que contiene 85% de etano, 10% de propano y 5% de metano, la mezcla fluye hacia un horno a $1400 \text{ m}^3/\text{s}$ a 140 bar y 287 K, considere que la mezcla se quema con 7% en exceso de aire.
- A condiciones normales de temperatura, presión y volumen. Calcule el valor de la constante R de los gases para 1 mol de sustancia.
- Si se sabe que un contenedor alberga 80 g de CO medidos a 0.80 atm y 290 K. Determine el volumen que ocupa el CO en dichas condiciones.
- Mediante la ecuación SRK obtenga la presión del nitrógeno en un tanque. que se encuentra a 30 °C y $0.7 \text{ m}^3/\text{mol}$ de volumen molar para el nitrógeno. Teniendo en cuenta que la presión y temperatura críticas del oxígeno son 34 atm y -146.95 °C y que el valor del factor acéntrico para el compuesto es de 0.039.
- Utilizando la regla para la mezcla de Kay determine el volumen molar de la siguiente mezcla de gases. Si se tiene una mezcla gaseosa con 40% N_2 y 60% de CO_2 los cuales están a 91,0 atm y 201,1 K. La presión crítica, la temperatura crítica, factor acéntrico y el peso molecular para el CO_2 son 72,9 atm, 30,85 °C, 0,239 y 44 g/mol. La presión crítica, la temperatura crítica, factor acéntrico y el peso molecular para el N_2 son 34 atm, -147,15 °C, 0.039 y 28 g/mol.

Referencias

Ghasem, N., & Henda, R. (2014). *Principles of chemical engineering processes: Material and energy balances*. CRC Press. <https://doi.org/10.1201/b17696>

Himmelblau David. (1997). *Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química* (6ta ed.). University of Texas.

- Hougen O. A., Watson K. M. y Ragatz R. A., *Chemical Process Principles* (2^o ed.) Wiley.
- Murphy, R. M. (2007). *Introducción a los procesos químicos: principios, análisis y síntesis*. (2da ed.). McGraw-Hill.
- Reid R. C., Prausnitz J. M., y Poling B. E., *The Properties of Gases and liquids*, (4a. ed.). McGraw-Hill.
- Torres Robles, R., & Castro Arellano, J. J. (2002). *Análisis y simulación de procesos de refinación del petróleo*. <http://site.ebrary.com/id/10365911>
- Turton Richard, Bailie Richard, Whiting Wallace, S. J. (2009). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*.
- Vladimir V. Veverka, F. M. (1997). *Material and Energy Balancing in the Process Industries: From Microscopic Balances to Large Plants* (L. M. Rose (ed.)). Elsevier Science B.V.

3

Balance de Materia Aplicados a la Química y Petroquímica para Sistemas Multifásicos

La mayoría de los sistemas usados en la industria química y afines, implican múltiples unidades de proceso que utilizan sistemas multifásicos que presentan mezclas simultáneas entre varias fases (sólido, líquido y gas); la mezcla más común suele ser entre líquido-gas o líquido-líquido. Las fases individuales que forman un sistema multifásico, se muestran por medio de diagramas que representan el estado físico de las diferentes sustancias a cierta presión y temperatura. Las separaciones más sencillas se las realiza a partir de mezclas compuestas por una especie A y una especie B, o en su defecto por dos especies inmiscibles. En el desarrollo de procesos multifásicos se deben incluir operaciones de cambios de fase como: destilaciones, congelaciones, condensación, evaporación, etc.

Objetivos de aprendizaje

- Identificar y calcular la presión de vapor a una temperatura específica, el punto de ebullición a una presión específica, mediante el uso de las

ecuaciones de Antoine, Clausius-Clapeyron y el análisis del diagrama de Cox.

- Comprender las definiciones conceptuales de la presión de vapor y la presión parcial.
- Comprender las definiciones de los conceptos de una sustancia saturada y sobresaturada.
- Describir los procesos de separación multifásico aplicados a los balances de materia.

3.1 Equilibrio de Fases de un Solo Componente

3.1.1 Diagrama de Fase

Un diagrama de fases es usado para observar el comportamiento de una sustancia pura en estado líquido, sólido o gaseoso, por ejemplo el agua puede presentarse en estado líquido a condiciones ambientales, es decir 1 atm y 25°C, mientras que a una temperatura de 130 °C y 0.132 atm el agua se encuentra en forma de gas, sin embargo, si se encuentra a 1 atm y 100°C el agua está en su estado gaseoso o líquido, o en una mezcla de ambos. Para observar el comportamiento de la fase de la sustancia pura, se debe graficar el parámetro de la temperatura en el eje horizontal vs el parámetro de la presión en el eje vertical. Si el vapor y el líquido de una sustancia coexisten en una línea en el diagrama de fases como se muestra en la figura 3.1, el ajuste de la temperatura o la presión serán las encargadas de determinar las condiciones del estado.

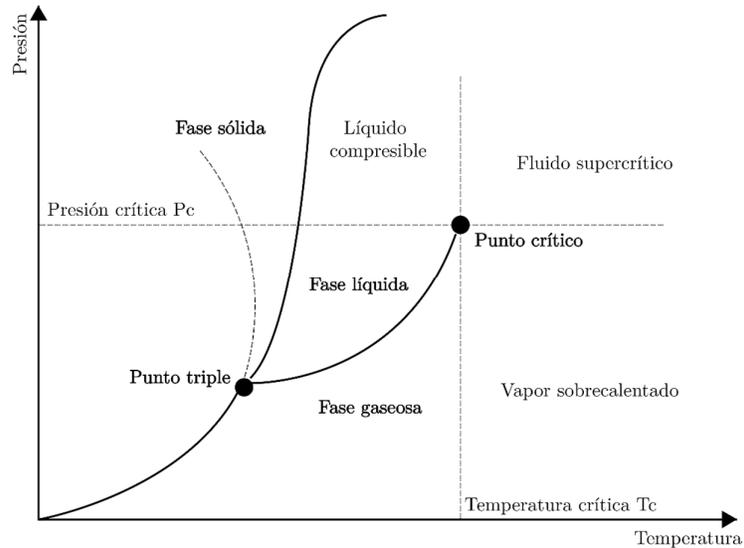


FIGURA 3.1.

Diagrama de fases

En la línea vapor-líquido del diagrama de la figura 3.1, la presión es conocida como presión de vapor y la temperatura es el punto de ebullición. La temperatura sobre la línea de vapor es conocida como el punto de sublimación, mientras que el punto de congelación o fusión se ubica en la línea de líquido-sólido. El lugar en donde se intersecan las curvas de las fases líquido, vapor y sólido es conocido como el punto triple, es el punto en donde las 3 fases coexisten a determinadas condiciones de presión y temperatura. En el sitio en donde se detiene la línea encargada de separar a las fases líquido- vapor, las densidades de ambas fases son las mismas; este punto es llamado punto crítico. Las sustancias que lleguen a alcanzar valores superiores al punto crítico pueden presentar características de ambas fases y se las conocen como fluidos supercríticos.

Es posible explicar el comportamiento de una sustancia mediante el análisis de un experimento. En un cilindro impermeable que contiene un pistón móvil y un regulador de temperatura se coloca cierta cantidad de agua pura como se muestra en la figura 3.2, se puede modificar la presión del sistema al variar la fuerza que ejerce el pistón.

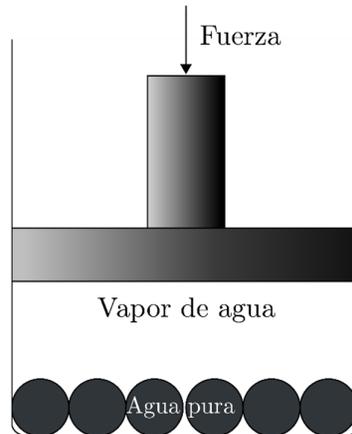


FIGURA 3.2.

Variación de la presión por aplicación de la fuerza.

Inicialmente el pistón comprime los fluidos que se encuentran a 20°C dentro del cilindro a 3 mm Hg en donde el agua solo puede estar en fase gaseosa como se muestra en el punto A de la figura 3.3 y el diagrama de la figura 3.4. En el punto B, se muestra la coexistencia de las fases vapor y líquido del agua cuando el pistón baja, elevando la presión a 17, 535 mm Hg y manteniendo la temperatura.

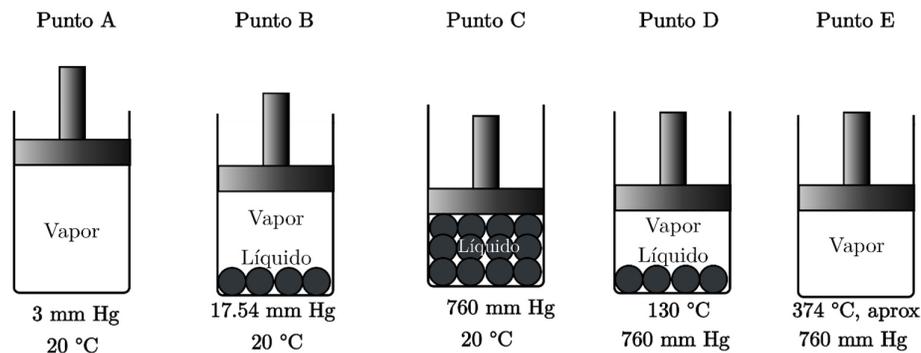


FIGURA 3.3.

Experimento del cilindro mostrando los puntos del diagrama de fases del agua.

A una misma temperatura de 20°C el agua puede encontrarse únicamente en fase líquida cuando el pistón ejerce mayor fuerza al sistema, elevando la presión a 760 mm Hg, como presenta la figura 3.3 mientras que cuando la presión se mantiene y la temperatura se eleva hasta 130°C , el agua del sistema vuelve a coexistir en

fases vapor-líquido como se muestra en el punto D del diagrama de fases del agua de la figura 3.4. Finalmente el punto E, muestra que el pistón no modifica la presión de 760 mm Hg, pero el regulador eleva la temperatura a casi su punto crítico de 374.3 °C, llegando a variar su composición a una única fase de gas.

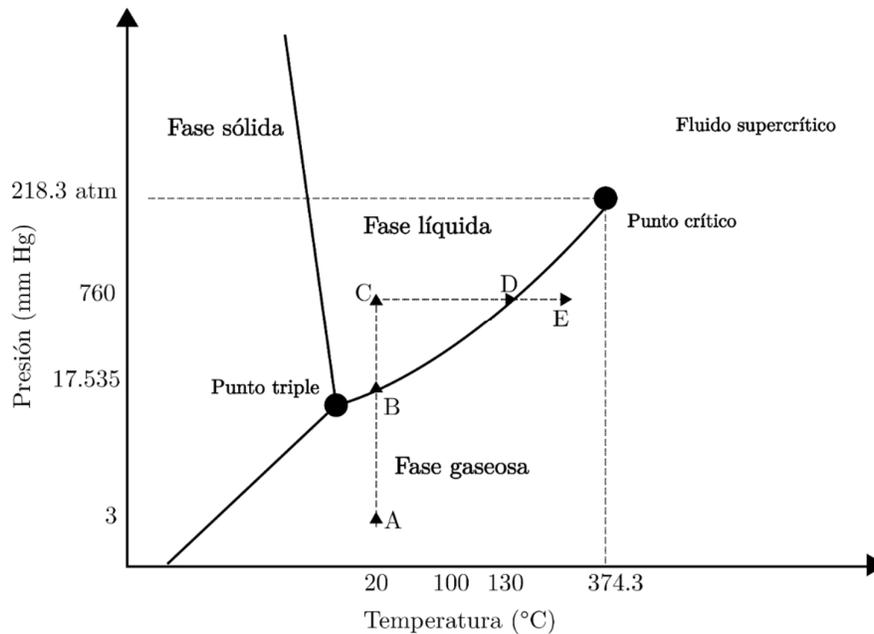


FIGURA 3.4.

Diagrama de fases del agua

3.1.2 Curva de equilibrio vapor-líquido

La línea que separa las fases líquido-vapor se denomina línea de equilibrio y son los puntos en donde pueden existir ambas fases. La figura 3.5 muestra el diagrama de fases del dióxido de carbono, donde la línea que parte desde el punto triple al punto crítico es el segmento en donde el dióxido de carbono líquido y vapor pueden coexistir.

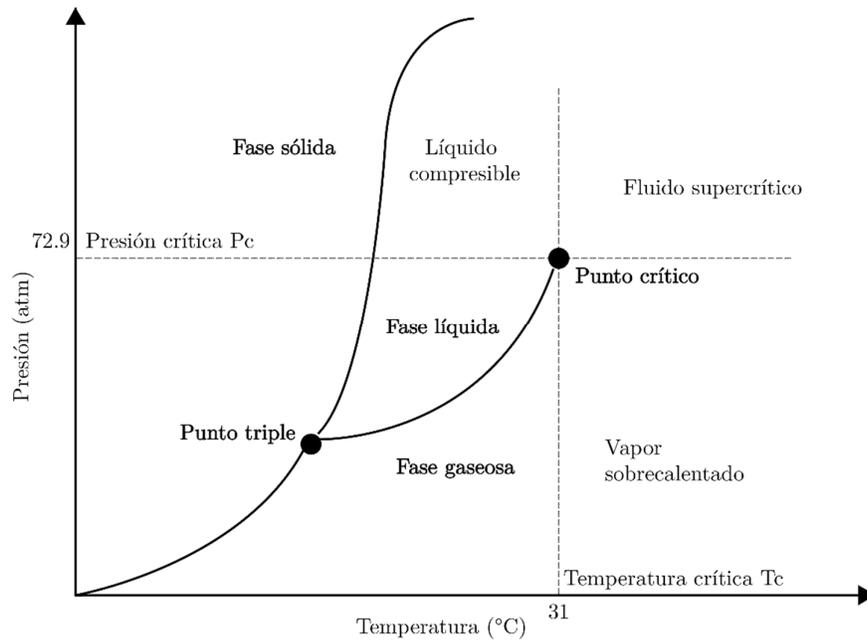


FIGURA 3.5.

Diagrama de fases del CO₂

Un punto (T, P) en la curva de equilibrio sólido-líquido muestra la temperatura de congelación de la sustancia a una presión P, por otro lado, cuando el punto (T, P) está en la curva de equilibrio líquido-vapor, el punto T muestra la temperatura de ebullición de la sustancia a una presión P.

3.1.3 Estimación de la presión de vapor

La presión de vapor de una sustancia pura es un parámetro que relaciona la coexistencia del estado líquido y vapor, en otras palabras es la presión a la que el vapor y el líquido están en equilibrio, también es conocida como presión de saturación; cada compuesto puro presenta un valor de presión de vapor a una temperatura determinada. La temperatura de saturación es conocida como punto de ebullición/condensación, también relaciona la coexistencia en equilibrio de las fases vapor-líquido a una determinada presión.

La destilación es un proceso de separación que usa la vaporización total o parcial de un componente de una mezcla y depende del nivel de volatilidad; la presión de

vapor de una sustancia se relaciona directamente con este proceso, debido a que una especie que presente un mayor valor de presión parcial a una temperatura cualquiera, significa que es una especie menos volátil en comparación con otra que presente menor valor de presión parcial. Existen varios métodos ayudan a estimar la presión de vapor mediante el uso de ecuaciones.

3.1.3.1 Ecuación Clapeyron

Relaciona cuantitativamente a la temperatura y la presión de vapor.

$$\frac{dP^*}{dT} = \frac{\Delta\hat{H}_v}{T(\hat{V}_g - \hat{V}_l)} \quad (3.1)$$

donde, $(\Delta\hat{H}_v)$ es el calor latente de vaporización, $(\hat{V}_g$ y $\hat{V}_l)$ son el volumen molar específico del gas y del líquido respectivamente y (T) es la temperatura absoluta.

Cuando la ecuación de Clapeyron considera el comportamiento de un gas ideal despreciando al líquido, se produce una simplificación del rango de temperatura a uno más pequeño, lo que modifica la expresión original de Clapeyron a una ecuación conocida como la ecuación de Clausius-Clapeyron.

3.1.3.1.1 Ecuación Clausius-Clapeyron

La ecuación de Clausius-Clapeyron parte de la consideración del comportamiento ideal de un gas que excluye la presencia de líquidos, es decir el volumen molar específico de la fase líquida es insignificante, lo cual permite reestructurar la ecuación considerando a la constante de los gases R , la temperatura T y la presión de vapor o saturación P^* , reordenando la ecuación de la siguiente manera:

$$\frac{d(\ln P^*)}{d\left(\frac{1}{T}\right)} = -\frac{\Delta\hat{H}_v}{R} \quad (3.2)$$

Esta ecuación permite desarrollar una curva de vaporización completa graficando el valor de $\ln P^*$ contra la inversa de la temperatura $1/T$ en una escala

semilogarítmica, obteniendo como pendiente de la curva a $-\frac{\Delta\hat{H}_v}{R}$. Al integrar la expresión (3.2) se obtiene la ecuación linealizada de Clausius-Clapeyron la que puede aplicarse para cualquier variación de estado. Se recomienda utilizar este modelo para rangos de temperatura pequeños donde la ley de gases ideales sea aplicable.

$$\ln P^* = -\frac{\Delta\hat{H}_v}{RT} + \beta \quad (3.3)$$

$$\ln P_2^* - \ln P_1^* = -\frac{\Delta\hat{H}_v}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \quad (3.4)$$

donde (P^*) es la presión de vapor de una sustancia, ($\Delta\hat{H}_v$) es el calor de vaporización. El parámetro (β) es una constante propia de la sustancia, por tanto varía dependiendo de la sustancia.

Ejemplo 3.1 Ecuación de Clapeyron

Lo hidrocarburos aromáticos más importantes en la industria son conocidos como BTX, conformados por xileno, tolueno y benceno. El benceno es el compuesto con mayor volatilidad, y mayormente usado, tiene una temperatura de ebullición de 80 °C a una presión de 101.325 kPa. Es retirado de la mezcla por un proceso de destilación, para ello, es necesario determinar la presión de vapor del compuesto aromático a temperatura ambiente.

Datos adicionales, el benceno tiene una entalpía estándar de vaporización $\Delta H_v = 30.8$ kJ / mol.

Solución

El problema propuesto menciona una variación de T y se debe considerar que la entalpía de vaporización tiende a variar cuando las condiciones de T y P cambian.

$$\ln P_2^* - \ln P_1^* = -\frac{\Delta \widehat{H}_v}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

Reemplazar los valores de presión de vapor y temperaturas en la ecuación de Clapeyron, considerando las mismas magnitudes.

$$T_1 = (80 + 273.15) \text{ K} = 353.15 \text{ K}$$

$$T_2 = (25 + 273.15) \text{ K} = 298.15 \text{ K}$$

$$\ln P_2^* - \ln(101.325 \text{ kPa}) = \frac{30.8 \times 10^3 \text{ J / mol}}{8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}} \left(\frac{1}{353.15 \text{ K}} - \frac{1}{298.15 \text{ K}} \right)$$

$$P_2^* = 14.6319 \text{ kPa}$$

Ejemplo 3.2 Entalpía de evaporación

De forma experimental se ha determinado la presión de vapor del benceno considerando la variación de la temperatura. Un primer análisis arrojó una presión de vapor de 71.8 mm Hg a 20°C, mientras que un segundo análisis arrojó una presión de vapor de 60 mm Hg a 15.6 °C. A partir de los datos arrojados determine la entalpía de vaporización del benceno y el valor de β empleando la ecuación de Clausius-Clapeyron.

Solución

De la ecuación determinada en el ejercicio anterior, se debe despejar el parámetro de entalpía de vaporización, obteniendo:

$$-\frac{\Delta \widehat{H}_v}{R} = \frac{(\ln P_2^* - \ln P_1^*)}{\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)}$$

$$-\frac{\Delta\widehat{H}_v}{R} = \frac{T_1 \times T_2 (\ln(P_2^*/P_1^*))}{(T_1 - T_2)}$$

$$-\frac{\Delta\widehat{H}_v}{R} = \frac{(288.6 \text{ K}) \times (293.15 \text{ K}) \left(\ln\left(\frac{71.8}{60}\right)\right) \text{ mmHg}}{(288.6 \text{ K} - 293.15 \text{ K})}$$

$$-\frac{\Delta\widehat{H}_v}{R} = -3338.38 \text{ K}$$

La ecuación (3.3) contiene el valor del parámetro β .

$$\ln P^* = -\frac{\Delta\widehat{H}_v}{RT} + \beta$$

$$\beta = \ln P_1^* + \frac{\Delta\widehat{H}_v}{RT_1}$$

$$\beta = \ln(60 \text{ mm Hg}) + \frac{3338.38 \text{ K}}{(288.6 \text{ K})}$$

$$\beta = 15.66$$

Obtener la ecuación de Clausius-Clapeyron en función de β .

$$\ln P^* = -\frac{3338.38 \text{ K}}{T} + 15.66$$

3.1.3.3 Gráfico de Cox

El diagrama de Cox, figura 3.6 relaciona mediante una gráfica los datos de presión de vapor incluyendo un amplio intervalo de temperaturas que abarca a varios componentes. Es un método gráfico que permite aproximar el valor de presión de vapor.

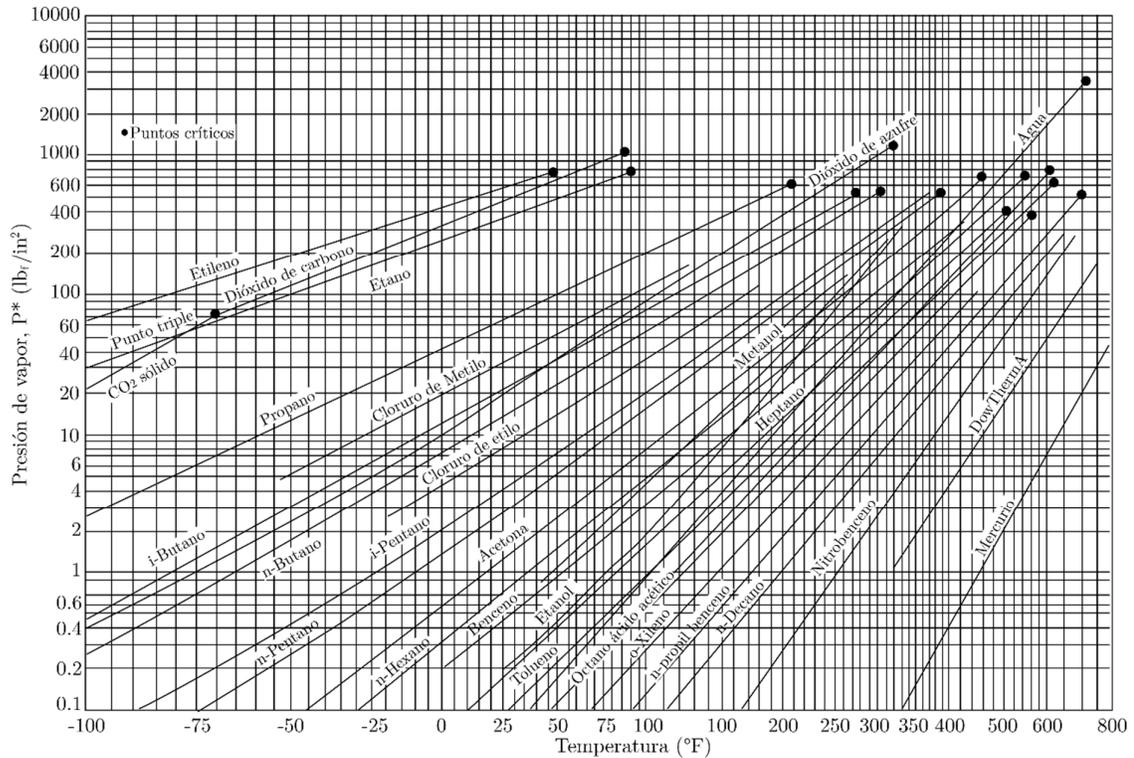


FIGURA 3.6.

Gráfica de Cox para determinar la presión de vapor. (Tomado de A. S. Foust et. al., Principles of Unit Operations, Wiley, New York, 1960, p.550)

Debido a que la presión de vapor de una especie varía drásticamente con la temperatura, existen tablas para poder determinar los valores de presión de vapor de una especie, sin embargo, resulta complicado interpolar los datos tabulados, porque pueden presentar errores considerables. Con el fin de mejorar la estimación de la presión de vapor, se usa la gráfica logarítmica con tendencia lineal entre la presión de vapor de algunos compuestos, en función de la presión de vapor de una especie de referencia (agua) a la misma temperatura como se muestra en la figura 3.7, disminuyendo los errores de estimación por interpolación de una tabla.

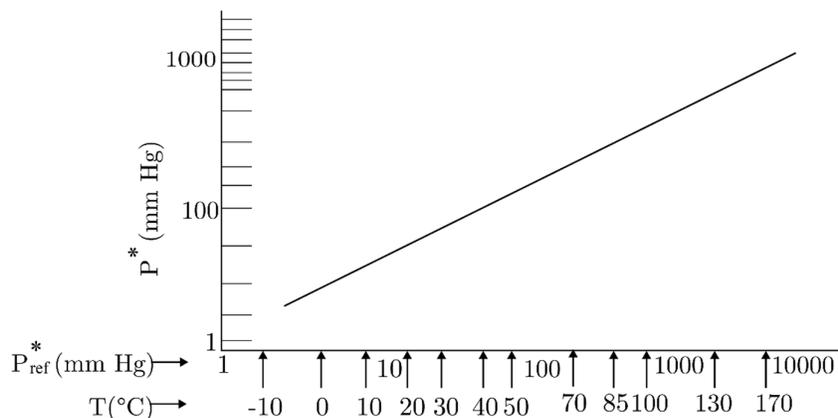


FIGURA 3.7.

Grafica de presión de vapor de la sustancia de referencia (agua), en el eje horizontal

3.1.3.4 Ecuación de Antoine

Es una ecuación empírica que relaciona los valores de presión de vapor (P^*) y la temperatura (T), y consta de tres parámetros en un rango de temperatura determinado.

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C} \quad (3.5)$$

$$P^* = \exp\left(A - \frac{B}{T + C}\right) \quad (3.6)$$

A, B y C son valores constantes que varían de un compuesto a otro, se denominan coeficientes de Antoine. Las unidades de la presión de vapor están en milímetros de mercurio (mm Hg) y la temperatura en kelvin (K). Los valores de las constantes de Antoine para algunos compuestos puros se encuentran en la tabla 3.1, mientras que en el Apéndice A.5 se presentan una variedad más extensa de estas constantes.

TABLA 3.1

Constantes de Antoine para el cálculo de la presión de vapor de componentes puros.

Componente	A	B	C
Ácido acético	16.8080	3405.57	-56.34
Acetona	16.6513	2940.46	-35.93
Amoniaco	16.9481	2132.50	-32.98
Acetato de etilo	16.1516	2790.50	-57.15
Benceno	15.9008	2788.51	-52.36
Etanol	18.5242	3578.91	-50.50
Metanol	18.5875	3626.55	-34.29
Tolueno	16.0137	3096.52	-53.67
Agua	18.3036	3816.44	-46.13
n-butano	6.808	935.77	238.789
Dióxido de azufre	5.966623	2385.003	-32.2139

A partir de estos datos tabulados se puede determinar la presión de vapor, utilizando la temperatura en Kelvin y en grados centígrados según las ecuaciones (3.7 a y b) y (3.8 a y b) respectivamente, variando los parámetros A, B, y C dependiendo del componente.

$$\ln (P^*) = A - \frac{B}{T + C} \quad (3.7 \text{ a})$$

$$P^* = \exp \left(A - \frac{B}{T + C} \right) \quad (3.7 \text{ b})$$

$$\text{Log}_{10}P^*(\text{mmHg}) = A - \frac{B}{T(^{\circ}\text{C}) + C} \quad (3.8 \text{ a})$$

$$P^*(\text{mmHg}) = 10^{\left(A - \frac{B}{T(^{\circ}\text{C}) + C}\right)} \quad (3.8 \text{ b})$$

Ejemplo 3.3 Determinación de la presión de vapor

Determine la presión de vapor a 150°C de los siguientes componentes puros

- a) Benceno
- b) Agua
- c) Acetona

Solución

- a) Para el componente benceno las constantes de Antoine fueron obtenidos de la tabla 3.1.

$$A = 15.9008$$

$$B = 2788.51$$

$$C = -52.36$$

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\ln(P^*) = 15.9008 - \frac{2788.51}{(150 + 273) - 52.36}$$

$$\ln(P^*) = 8.377$$

$$P^* = 4345.95 \text{ mm Hg}$$

- b) Para el componente agua las constantes de Antoine fueron obtenidos de la tabla 3.1.

$$A = 18.3036$$

$$B = 3816.44$$

$$C = -46.13$$

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\ln(P^*) = 18.3036 - \frac{3816.44}{(150 + 273) - 46.13}$$

$$\ln(P^*) = 8.177$$

$$P^* = 3558.16 \text{ mm Hg}$$

c) Para el componente acetona las constantes de Antoine fueron obtenidos de la tabla 3.1.

$$A = 16.6513$$

$$B = 2940.46$$

$$C = -35.93$$

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\ln(P^*) = 16.6513 - \frac{2940.46}{(150 + 273) - 35.93}$$

$$\ln(P^*) = 9.054$$

$$P^* = 8552.68 \text{ mm Hg}$$

Ejemplo 3.4 Composición molar de una fase gaseosa

Una mezcla bifásica de aire y agua coexisten en equilibrio a 75°C dentro de un cilindro cerrado y 760 mm Hg. Se desea determinar la composición molar de la fase gaseosa.

Solución

Hay que determinar el valor de la presión de vapor del agua a las condiciones establecidas en el ejemplo. Entonces, para el componente agua las constantes de Antoine fueron obtenidos de la tabla 3.1.

$$A = 18.3036$$

$$B = 3816.44$$

$$C = -46.13$$

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\ln(P^*) = 18.3036 - \frac{3816.44}{(80 + 273) - 46.13}$$

$$P_{\text{H}_2\text{O}}^* = 353.16 \text{ mm Hg}$$

$$y_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}^*}{P} = \frac{353.16 \text{ mm Hg}}{760 \text{ mm Hg}} = 0.464$$

$$y_{\text{aire,seco}} = 1 - y_{\text{H}_2\text{O}} = 1 - 0.464 = 0.536$$

Ejemplo 3.5 Presión de vapor mediante la gráfica de Cox y la ecuación de Antoine

Determine el valor de la presión de vapor del componente n-butano a 80°C por el método gráfico de Cox y compare los resultados con los valores determinados por la ecuación de Antoine.

Solución

Para comparar el método gráfico con el uso de la ecuación de Antoine, es necesario calcular por este segundo método el valor de la presión de vapor del compuesto n-butano. Para este componente las constantes de Antoine fueron obtenidos de la tabla 3.1.

$$A = 6.808$$

$$B = 935.77$$

$$C = 238.789$$

$$\log_{10}(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\log_{10}(P^*) = 6.808 - \frac{935.77}{(80) + 238.789}$$

$$P_{\text{H}_2\text{O}}^* = 7458 \text{ mm Hg}$$

$$P_{\text{H}_2\text{O}}^* = 745.8 \text{ cm Hg}$$

El método gráfico usa el diagrama de Cox mostrado en la figura del ejemplo 3.4.1 que incluye una curva para el componente n-butano. Al trazar una recta vertical en el valor de temperatura de 80 °C hasta intersectar la curva correspondiente al n-butano, se puede observar en el eje de la presión de vapor un valor de 700 cm Hg aproximadamente.

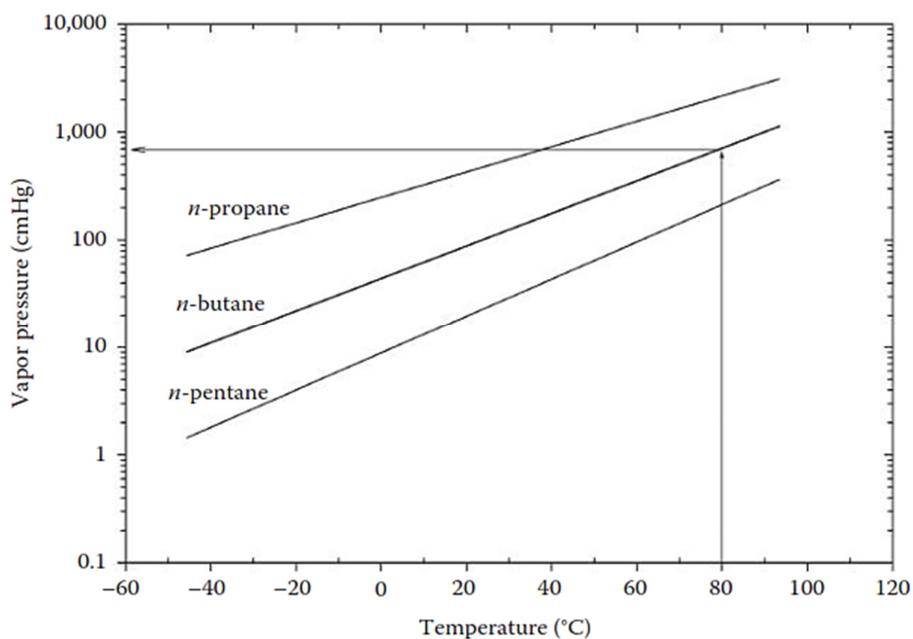


FIGURA DEL EJEMPLO 3.5.1

Diagrama de Cox de las presiones de vapor para n-butano. (Tomado de Cox, E.R., Ind. Eng. Chem., 15(6), 592, 1923. With permission.)

Este segundo método es poco exacto, y es posible determinar el error diferencial que presenta un método de otro de la siguiente manera.

$$\text{error} = P_{\text{Ec.de Antoine}}^* - P_{\text{Método gráfico}}^*$$

$$\text{error} = 745.8 \text{ cm Hg} - 700 \text{ cm Hg}$$

$$\text{error} = 45.8 \text{ cm Hg}$$

3.1.4 Estimación de la Presión Parcial

Una mezcla de gases está constituido por dos o más gases diferentes, y cada uno ejerce una presión independiente en el recipiente que los contiene, la suma de las presiones parciales de cada gas da como resultado la presión total del sistema. Los gases se caracterizan por la capacidad de compresión de sus moléculas, es decir, al agregar una cantidad adicional de gases a un recipiente, el volumen del gas inicial se comprime para facilitar el ingreso del nuevo componente de la mezcla, provocando únicamente el aumento de la presión del sistema.

Por ejemplo, la cantidad adecuada o perjudicial de un gas sobre una reacción química o el ingreso a una unidad de proceso se relaciona con la presión que proporciona ese gas al sistema de operación y no a una magnitud volumétrica.

3.1.4.1 Ley de Dalton para Presiones Parciales

La presión que un gas ejerce en el sistema como si fuese el único gas contenido en un recipiente se relaciona con la ley de Dalton de las presiones parciales. La ley de Dalton menciona que la presión total de un sistema es la suma de todas las presiones parciales de los gases que conforman la mezcla, esta ley se expresa como se muestra a continuación.

$$P = \sum P_i \quad (3.9)$$

La presión parcial de un gas en una mezcla se representa de la siguiente forma:

$$P_i = P y_i \quad (3.10)$$

donde, (P) es la presión total de la mezcla, (P_i) representa la presión parcial de cada gas y (y_i) es la fracción molar del gas en la mezcla.

Ejemplo 3.6 Determinación de la presión parcial.

El gas natural está conformado por varios componentes en diferentes porcentajes de concentración. El metano es el principal componente de la mezcla con una fracción molar igual o mayor al 92%, seguido del etano que complementa a la mezcla con un 2%, y otros gases como CO_2 , O_2 , N_2 y H_2S con fracciones molares del 2.8%, 0.2%, 0.5%, y 0.5% respectivamente. Las composiciones del gas natural tienden a variar de acuerdo con el sitio de donde sea extraída la mezcla gaseosa. Cierta cantidad de gas natural con las composiciones mencionadas pretende ser ingresado en un cilindro a 760 mm Hg, determine cuál es la presión parcial que cada componente de la mezcla aporta al cilindro.

Solución

Es necesario usar la ecuación (3.10) para determinar la presión parcial de cada componente del gas natural.

$$P_i = P y_i$$

Composiciones molares

Componente	Composición molar y_i
Metano	0.92
Etano	0.02

Dióxido de carbono	0.048
Oxígeno	0.002
Nitrógeno	0.005
Hidruro de azufre	0.005

$$P_{\text{CH}_4} = 760 \text{ mm Hg}(0.92) = 699.2 \text{ mm Hg}$$

$$P_{\text{C}_2\text{H}_6} = 760 \text{ mm Hg}(0.02) = 15.2 \text{ mm Hg}$$

$$P_{\text{CO}_2} = 760 \text{ mm Hg}(0.048) = 36.48 \text{ mm Hg}$$

$$P_{\text{O}_2} = 760 \text{ mm Hg}(0.002) = 1.52 \text{ mm Hg}$$

$$P_{\text{N}_2} = 760 \text{ mm Hg}(0.005) = 3.8 \text{ mm Hg}$$

$$P_{\text{H}_2\text{S}} = 760 \text{ mm Hg}(0.005) = 3.8 \text{ mm Hg}$$

3.2 Regla de las Fases de Gibbs

En un sistema en el que se mezclan dos fases, los componentes de cada fase sufren cambios como condensación, evaporación, etc., hasta alcanzar un estado de equilibrio en el que las fases están a la misma presión y temperatura. Por ejemplo, en un recipiente cerrado se encuentran coexistiendo agua líquida y aire a condiciones establecidas por el equilibrio, al destapar el recipiente la cantidad de aire contenida varía, es decir, la masa del sistema cambia generando una variación desde un equilibrio inicial hasta conseguir un segundo equilibrio. La regla de fases de Gibbs se relaciona con los conceptos de variables extensivas e intensivas.

Las variables extensivas como la masa y el volumen dependen del tamaño del sistema, mientras que las variables intensivas como la densidad, composiciones molares de cada fase, T y P son independientes del tamaño del sistema. La regla de fases de Gibbs, define el número de propiedades intensivas que se deben especificar en un sistema, y se establece una relación para encontrar las variables intensivas faltantes, a este proceso se le conoce como el análisis de grados de libertad GDL, entonces, la regla de fases se define como se muestra a continuación.

$$\text{GDL} = m + 2 - \pi - r \quad (3.11)$$

donde, (GDL) es el grado de libertad, se define como el número de variables independientes del equilibrio de fases, (m) es el número de componentes, (π) es el número de fases y (r) representa al número de reacciones que intervienen en el proceso. Si no hay reacciones en el sistema se puede simplificar este último término.

$$\text{GDL} = m + 2 - \pi \quad (3.12)$$

El análisis de los grados de libertad es similar a lo mencionado en los temas abarcados anteriormente. Para la regla de fase de Gibbs los grados de libertad se definen como el número de variables intensivas especificadas en un sistema en equilibrio. Es necesario especificar los grados de libertad, para poder determinar las propiedades intensivas desconocidas.

Ejemplo 3.7 Aplicación de la regla de fases de Gibbs

Determinar los grados de libertad de una mezcla de agua en estado vapor y acetona en estado líquido.

Solución

Identificar cada parámetro que conforma la ecuación (3.11).

El agua está en fase vapor y acetona en fase líquida, entonces hay dos fases. El agua y la acetona son los componentes presentes, por lo tanto, el número de componentes es igual dos. El problema no especifica una reacción en la que el agua y la acetona se incluyan, entonces $r = 0$.

$$\text{GDL} = m + 2 - \pi - r$$

$$\text{GDL} = 2 + 2 - 2 - 0$$

$$\text{GDL} = 2$$

Luego del análisis se determina que es necesario fijar 2 variables independientes para el sistema. Por ejemplo, P y T para obtener las fracciones molares de agua y acetona en las dos fases. Con estas variables se puede determinar la fracción molar de agua en vapor y la respectiva temperatura, y se determinan valores de presión, para obtener la fracción molar de agua en el líquido.

Ejemplo 3.8 Regla de fases de Gibbs en una mezcla trifásica.

Una mezcla trifásica compuesta por un solo componente en estado sólido, líquido y vapor es contenido en un recipiente cerrado. Determine los grados de libertad de sistema, y mencione posibles variables independientes aplicables al sistema de ser el caso.

Solución

Identificar cada parámetro que conforma la ecuación (3.11).

El compuesto está en fase vapor, líquido y sólido formando un sistema en equilibrio, entonces están presentes tres fases. Adicionalmente, el problema menciona la existencia de un solo componente y no especifica una reacción entonces $r = 0$.

$$\text{GDL} = m + 2 - \pi - r$$

$$GDL = 1 + 2 - 3 - 0$$

$$GDL = 0$$

Luego del análisis se determina que no es necesario fijar alguna variable independiente para el sistema. El sistema se encuentra a la misma T y P en equilibrio.

3.3 Sistemas Gas-Líquido: un Componente Condensable

En sistemas en el que solo un componente puede estar en fase líquida o vapor en determinadas condiciones, es necesaria una ley para describir el comportamiento del componente que cambia de fase. Por ejemplo, en un proceso de evaporación de alcohol; el alcohol ingresa a un destilador que presenta dos fases, la líquida conformada por el alcohol y la fase gaseosa conformada por el aire del sistema. Para evaporar cierta cantidad de alcohol del sistema, las condiciones iniciales del sistema cambian al elevar la temperatura; haciendo que la fracción molar de alcohol en la fase gaseosa se eleve incrementando la presión del sistema. Este procedimiento se detiene cuando la velocidad a la que las moléculas de alcohol pasan a formar parte de la fase gaseosa se acerca a cero, frenando el aumento de la fracción molar del alcohol en la fase gaseosa. Cuando esto ocurre se dice que la fase gaseosa está saturada de alcohol. Un sistema líquido-gas se encuentra en equilibrio cuando los componentes volátiles de la fase líquida se encuentran saturando a la fase gas.

La ley de Raoult establece que la presión parcial del componente i en la mezcla de gases es igual a la presión de vapor del componente i puro, considerando que al reducir la temperatura del sistema, solamente la fracción de vapor del componente i sea la especie condensable, Si, $P_i^* = P_i$ el vapor está saturado e incrementar el valor de la presión parcial produciría la condensación del componente.

$$P_i^* = P_i \quad (3.13)$$

$$P_i^* = y_i P \quad (3.14)$$

donde (P_i^*) representa a la presión de vapor del componente puro i , (P_i) es la presión parcial de componente i en la mezcla, (y_i) es la fracción molar del componente i en la fase gaseosa y (P) es la presión total del sistema.

La presión parcial del componente i en la fase gaseosa está en equilibrio con la del líquido, obteniendo la siguiente relación:

$$P_i = y_i P = x_i P_i^* \quad (3.15)$$

Cuando $P_i = y_i P < P_i^*$ se habla de un vapor sobrecalentado, es decir, el vapor de un componente líquido que se encuentra en la fase gaseosa es menor al punto en el que se produce la saturación. Cuando la temperatura se reduce a presión constante en la fase gaseosa que contiene al vapor sobrecalentado produce una saturación del vapor, conocido como punto de rocío.

$$P_i = y_i P = P_i^*(T_{pr}) \quad (3.16)$$

Ejemplo 3.9 Cálculo de la composición de un sistema gas-vapor saturado

Una solución contiene 10 moles de agua y 5 moles de *i*-butano a 50°C y 760 mm Hg de presión. Determine las fracciones molares de cada componente y sus presiones de vapor.

Solución

Que el sistema se encuentre en equilibrio, significa que el *i*-butano se encuentra saturado con vapor de agua. Es necesario determinar las fracciones molares del agua en fase líquida

Agua = A = 10 mol

i-butano = B = 5 mol

$$n_T = n_A + n_B$$

$$n_T = 10 \text{ mol} + 5 \text{ mol}$$

$$n_T = 15 \text{ mol}$$

Fracciones molares

$$x_A = \frac{n_A}{n_T}$$

$$x_A = \frac{10 \text{ mol}}{15 \text{ mol}} = 0.67$$

$$x_B = \frac{5 \text{ mol}}{15 \text{ mol}} = 0.33$$

Para determinar la presión parcial del agua en la fase gaseosa se debe aplicar la ley de Raoult, pero antes hay que estimar la presión de vapor con algún método estudiado.

A= 18.3036, B= 3816.44, C= -46.13

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\ln(P^*) = 18.3036 - \frac{3816.44}{(50 + 273) - 46.13}$$

$$P_A^* = 91.77 \text{ mm Hg}$$

A= 6.78866, B= 899.617, C= 241.942

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\ln(P^*) = 6.78866 - \frac{899.617}{(50 + 273) + 241.942}$$

$$P_B^* = 180.59 \text{ mm Hg}$$

Aplicando la ley de Raoult

$$P_i = x_i P_i^*$$

$$P_{\text{agua}} = 0.67(91.77 \text{ mm Hg}) = 61.48 \text{ mm Hg}$$

$$P_{i\text{-butano}} = 0.33(180.59 \text{ mm Hg}) = 59.595 \text{ mm Hg}$$

Ejemplo 3.10 Balance de materia en un condensador como sistema de separación de fases

Una corriente compuesta de agua y aire seco con composiciones molares de 10% y 90% respectivamente, ingresan a un condensador a condiciones de 100 °C y 4260 torr. El condensador enfría a la corriente de entrada hasta 80°C manteniendo constante a la presión y retirando cierta cantidad de agua líquida del sistema.

- Identifique si el vapor es saturado o sobrecalentado y de ser el caso determine la temperatura del punto crítico.
- Determine el porcentaje de vapor que se condensa y la composición de salida de la fase gaseosa.
- Luego asuma que el sistema es comprimido hasta 8500 torr a temperatura constante, y calcule las composiciones de salida de la fase gaseosa y la cantidad de vapor de agua condensado.

Solución

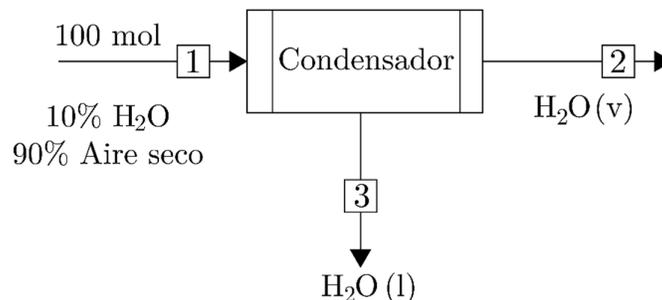


FIGURA DEL EJEMPLO 3.10.1

Diagrama de flujo de un sistema de condensación

a) Determinar si el vapor que ingresa al condensador se encuentra saturado o sobrecalentado, mediante la siguiente consideración

Si, $P_i = y_i P < P_i^*$ es vapor sobrecalentado

Presión parcial del agua

$$P_{H_2O} = y_{H_2O} \times P$$

$$P_{H_2O} = 0.10 \times 4260 \text{ torr}$$

$$P_{H_2O} = 426 \text{ torr}$$

Presión de vapor del agua

Constantes de Antoine.

$$A = 18.3036, B = 3816.44, C = -46.13$$

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\ln(P^*) = 18.3036 - \frac{3816.44}{(100 + 273.15) - 46.13}$$

$$P_{H_2O}^* = 759.9 \text{ torr}$$

Si $P_{H_2O} < P_{H_2O}^*$, entonces $426 \text{ torr} < 759.9 \text{ torr}$, como la condición se cumple se asegura que el vapor es sobrecalentado, entonces se cumple que

$$P_{H_2O} = P_{H_2O}^*(T_{pr}) = 426 \text{ torr}$$

Es necesario determinar la temperatura del punto de rocío, usando el apéndice A.4. Se debe interpolar entre los valores de presión cercanos a 426 mm Hg hasta estimar el valor de T adecuado.

$$P_i = y_i P = P_i^*(T_{pr})$$

$$T_{pr} = 80.45 \text{ } ^\circ\text{C}$$

b) Balance de materia con presión constante

Aplicando la ley de Raoult en la corriente de salida con $T = 80\text{ }^{\circ}\text{C}$, es posible determinar la fracción de vapor de agua en la corriente 2. Es necesario determinar la presión de vapor del agua a esta nueva temperatura de salida.

Determinar la $P_i^*(80^{\circ}\text{C})$

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\ln(P^*) = 18.3036 - \frac{3816.44}{(80 + 273.15) - 46.13}$$

$$P_{\text{H}_2\text{O}}^* = 355.31 \text{ torr}$$

$$y_i = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}^*(T)}{P} = \frac{355.31 \text{ torr}}{4260 \text{ torr}} = 0.083$$

Balance de materia del aire seco

$$E = S$$

$$n_1 y_{\text{aire}} = n_2 (1 - y_{\text{H}_2\text{O}})$$

$$100 \text{ mol} \times 0.9 = n_2 (1 - 0.083)$$

$$n_2 = 98.15 \text{ mol}$$

Balance molar total

$$E = S$$

$$n_1 = n_2 + n_3$$

$$100 \text{ mol} = 98.15 \text{ mol} + n_3$$

$$n_3 = 1.85 \text{ mol}$$

La cantidad total de la corriente 3, pertenece al agua condensada del sistema.

Cálculo del porcentaje de condensación

$$\frac{n_3}{n_1 \times y_{\text{H}_2\text{O}}} \times 100$$

$$\frac{1.85 \text{ mol}}{100 \text{ mol} (0.1)} \times 100 = 18.5 \%$$

c) Balance de materia con temperatura constante

Es necesario determinar la presión de saturación, es decir, identificar la presión máxima antes de que inicie la condensación.

$$P_{\text{saturación}} = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}^*(100^\circ\text{C})}{y_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{760 \text{ torr}}{0.1} = 7600 \text{ torr}$$

Al mantener la temperatura constante, la presión de la corriente de salida es 8500 torr.

Aplicar la ley de Raoult en la corriente de salida

$$y_i = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}^*(100^\circ\text{C})}{P} = \frac{760 \text{ torr}}{8500 \text{ torr}} = 0.089$$

Balance de masa del aire seco

$$E = S$$

$$n_1 y_{\text{aire}} = n_2 (1 - y_{\text{H}_2\text{O}})$$

$$100 \text{ mol} \times 0.9 = n_2 (1 - 0.089)$$

$$n_2 = 98.79 \text{ mol}$$

Balance molar total

$$E = S$$

$$n_1 = n_2 + n_3$$

$$100 \text{ mol} = 98.79 \text{ mol} + n_3$$

$$n_3 = 1.21 \text{ mol}$$

De igual manera, la cantidad total de la corriente 3, pertenece al agua condensada del sistema.

Cálculo del porcentaje de condensación

$$\frac{n_3}{n_1 \times Y_{H_2O}} \times 100$$

$$\frac{1.21 \text{ mol}}{100 \text{ mol (0.1)}} \times 100 = 12.1 \%$$

3.4 Sistema Multicomponente Gas-Líquido

Son procesos que incluyen varios componentes tanto en fase gas como líquida, esto conlleva a que existan separaciones en operaciones unitarias como destilación, absorción o desorción al ponerse en contacto las especies de cada fase. Para llegar a un estado de equilibrio debe existir una transferencia de materia de las especies que se encuentran en contacto, debido a una fuerza impulsora.

Al alcanzar el equilibrio las composiciones de cada fase son constantes, esto hace que sea posible detallar las variables intensivas que conforman el sistema, y mediante el uso de relaciones de equilibrio se pueden determinar las variables del sistema para la distribución de componentes entre las fases gas y líquido de múltiples componentes.

Ejemplo 3.11 Balance de materia en un sistema de absorción de SO₂

En un proceso de absorción es necesario determinar la fracción de SO₂ que es absorbido por el agua y la velocidad de flujo a la que el agua ingresa a la unidad. Una corriente gaseosa compuesta por 40% dióxido de azufre y 60% de aire con un flujo total de 150 mol/h ingresa a un absorbedor a 30°C y se pone en contacto con una segunda corriente de agua líquida. Del absorbedor sale una corriente líquida que contiene 5

moles de dióxido de azufre por cada 100 moles de agua, mientras que en la corriente gaseosa salen ciertas cantidades de vapor de agua, SO₂ y aire a 30°C y 760 mm Hg.

Dato adicional, la presión parcial del dióxido de azufre es 176 mm Hg en relación a la composición que se menciona en la alimentación.

Solución

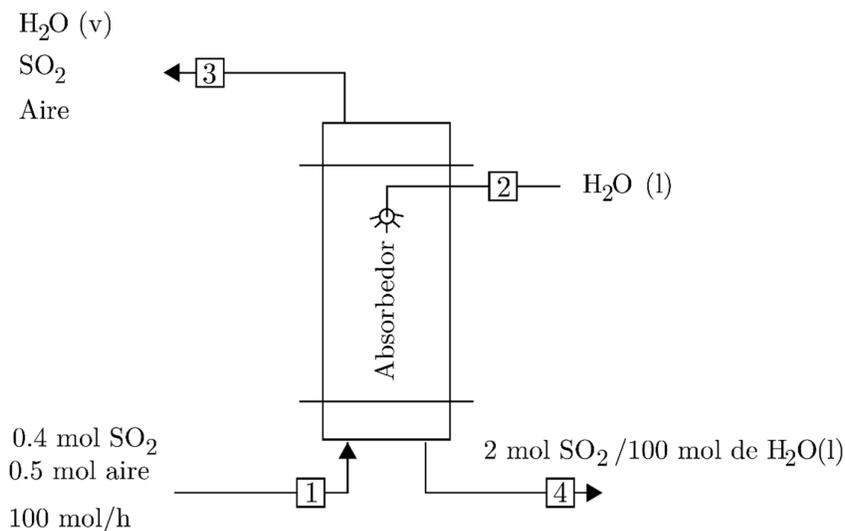


FIGURA DEL EJEMPLO 3.11.1

Sistema de absorción de dióxido de azufre con agua.

Determinación de las presiones de vapor

Las constantes de Antoine del agua son:

$$A = 18.3036, B = 3816.44, C = -46.13$$

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$\ln(P^*) = 18.3036 - \frac{3816.44}{(30 + 273.15) - 46.13}$$

$$P_{\text{H}_2\text{O}}^* = 31.65 \text{ mm Hg}$$

Las composiciones gaseosas de cada componente a la salida del sistema.

$$y_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P} = \frac{31.65 \text{ mm Hg}}{760 \text{ mm Hg}} = 0.042$$

$$y_{\text{SO}_2} = \frac{P_{\text{SO}_2}}{P} = \frac{176 \text{ mm Hg}}{760 \text{ mm Hg}} = 0.232$$

$$y_{\text{aire}} = 1 - y_{\text{SO}_2} - y_{\text{H}_2\text{O}}$$

$$y_{\text{aire}} = 1 - 0.232 - 0.042 = 0.726$$

Balance de materia para el aire

$$E = S$$

$$\dot{n}_1 y_{\text{aire}} = \dot{n}_3 (1 - y_{\text{H}_2\text{O}})$$

$$150 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \times 0.6 = \dot{n}_3 (1 - 0.726)$$

$$\dot{n}_3 = 123.96 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Composiciones molares de la corriente líquida a la salida del absorbedor

$$x_{\text{SO}_2} = \frac{2 \text{ mol}}{102 \text{ mol}} = 0.0196$$

$$x_{\text{H}_2\text{O}} = 1 - x_{\text{SO}_2}$$

$$x_{\text{H}_2\text{O}} = 1 - 0.0196 = 0.9804$$

Balance de masa para el dióxido de azufre

$$\dot{n}_1 y_{\text{SO}_2} = \dot{n}_4 y_{\text{SO}_2} + \dot{n}_3 x_{\text{SO}_2}$$

$$150 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \times 0.4 = 123.96 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \times 0.232 + \dot{n}_3 \times 0.0196 \frac{\text{g SO}_2}{\text{mol}} \times \frac{\text{mol SO}_2}{64 \text{ g}}$$

$$\dot{n}_3 = 102012.34 \frac{\text{g}}{\text{h}}$$

Balance de materia del agua

$$\dot{n}_2 = \dot{n}_4 y_{\text{H}_2\text{O}} + \dot{n}_3 x_{\text{H}_2\text{O}}$$

$$\dot{n}_2 = 123.96 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \times 0.042 \frac{\text{mol H}_2\text{O}}{\text{g}} \times \frac{18 \text{ g}}{\text{mol H}_2\text{O}} + 102012.34 \frac{\text{g}}{\text{h}} \\ \times 0.9804$$

$$\text{Alimentación de agua} = \dot{n}_2 = 100106.612 \frac{\text{g H}_2\text{O}}{\text{h}}$$

La ley de Henry se aplica cuando una especie volátil se disuelve en una solución líquida, generalmente es utilizada cuando la composición x_i se aproxima a cero, considerando que el componente i no se logre ionizar, disociar o reaccionar en la fase líquida.

La expresión de la ley de Henry es:

$$P_i = P_T y_i = x_i H_i \quad (3.17)$$

donde, (H_i) representa la constante de la ley de Henry para un componente i en un solvente. La constante de Henry se relaciona con la solubilidad del compuesto condensable del sistema mediante la ecuación (3.18), siendo $H_i = 1/x$

$$\ln(x) = A + \frac{B}{T} + C \ln(T) + D \times T \quad (3.18)$$

donde, el parámetro (x) es la fracción molar del soluto disuelto en el agua, $(A, B, C$ y $D)$ son valores constantes que varían de un componente a otro y dependen de la temperatura (T) que se encuentra en grados kelvin, para encontrar H_i a temperaturas distintas de 25°C , primero calcule la solubilidad y tome el valor del recíproco.

Las constantes A, B, C y D y valores de constantes de Henry para varios compuestos en agua a 25°C se encuentran en el apéndice A.7.

En resumen la ley de Raoult se aplica en sistemas multicomponentes que tienden a ser condensables, es decir, cuando la fase predominante es líquida, a diferencia de la ley de Henry que es aplicable a mezclas de gases no condensables cuando la fase predominante es gas.

Ejemplo 3.12 Aplicación de la ley de Henry o Raoult

Identifique cual es la ley que puede aplicarse a las siguientes situaciones:

- Agua a 25 °C y 15 atm se encuentra en contacto con cierto gas conformado por 3 mol % de metano. Mediante la aplicación de la ley de Raoult o Henry determine la fracción molar del metano disuelto.
- La fase líquida y vapor de una mezcla de benceno y tolueno en composiciones 45 y 55% se encuentran en equilibrio a 50°C. ¿Cuál es la presión y la composición de la fase vapor del sistema?

Solución

- El metano es un hidrocarburo es un compuesto volátil, para formar una solución con agua debería estar muy diluido. Por tanto es factible usar la ecuación de Henry en este caso.

La constante de Henry para el metano disuelto en agua a 25°C obtenida en el apéndice A.7 es 36600 atm/fracción mol.

Mediante la ecuación (3.17), se determina la fracción molar del metano disuelto.

$$P_T y_i = x_i H_i$$

$$x_{\text{metano}} = \frac{y_{\text{metano}} \times P}{H_{\text{metano}@25^\circ\text{C}}}$$

$$x_{\text{metano}} = \frac{0.03 \times 17 \text{ atm}}{36600 \frac{\text{atm}}{\text{fracción mol}}} = 1.39 \times 10^{-6} \frac{\text{mol CH}_4}{\text{mol}}$$

- b) Para estimar la presión del sistema en una mezcla de tolueno-benceno, es necesario aplicar la ley de Raoult, determinando las presiones parciales mediante la ecuación (3.7) y las constantes de Antoine.

$$\text{Log}_{10}P^*(\text{mmHg}) = A - \frac{B}{T(^{\circ}\text{C}) + C}$$

$$\text{Log}_{10}P^*_{\text{benceno}} = 6.906 - \frac{1211}{50^{\circ}\text{C} + 220.8} = 271.68 \text{ mm Hg}$$

$$\text{Log}_{10}P^*_{\text{tolueno}} = 6.9533 - \frac{1343.9}{50^{\circ}\text{C} + 219.38} = 92.14 \text{ mm Hg}$$

Aplicando la ecuación (3.15), es posible determinar la presión parcial que cada componente aporta al sistema.

$$P_{\text{benceno}} = (0.45) \times 271.68 \text{ mm Hg} = 122.256 \text{ mm Hg}$$

$$P_{\text{tolueno}} = (0.55) \times 92.14 \text{ mm Hg} = 50.68 \text{ mm Hg}$$

$$P = P_{\text{benceno}} + P_{\text{tolueno}}$$

$$P = 122.256 \text{ mm Hg} + 50.68 \text{ mm Hg}$$

$$P = 172.936 \text{ mm Hg}$$

Para determinar las composiciones en la fase gaseosa hay que relacionar las presiones parciales de los componentes de la mezcla con la presión total del sistema.

$$y_{\text{benceno}} = \frac{P_{\text{benceno}}}{P} = \frac{122.256 \text{ mm Hg}}{172.936 \text{ mm Hg}} = 0.706$$

$$y_{\text{tolueno}} = \frac{P_{\text{tolueno}}}{P} = 1 - y_{\text{benceno}} = 1 - 0.706 = 0.294$$

3.4.1 Equilibrio vapor-líquido para soluciones ideales.

Al calentar gradualmente un líquido puro contenido en un recipiente que mantiene su presión constante, se observa que la temperatura incrementa hasta que el líquido alcanza el punto de ebullición, en este punto la temperatura permanece

constante hasta que todo el líquido se evapore y las composiciones tanto en líquido como en vapor serán iguales; al adicionar más calor la temperatura del vapor aumenta.

Si se tiene una mezcla líquida de varios componentes y se incrementa gradualmente el calor, la temperatura del líquido aumentará hasta alcanzar la primera burbuja de vapor del componente más volátil, en este caso el vapor que se ha generado tendrá una composición diferente a la del líquido. A medida que los componentes de la mezcla líquida se evaporan desde el más volátil al menos volátil la temperatura de evaporización cambia. El proceso de condensación de una mezcla de vapores sigue el mismo principio, es decir la primera gota condensa a una temperatura determinada, provocando que las composiciones del vapor-líquido y la temperatura de condensación vayan variando a medida que cada componente se condensa.

Temperatura del punto de burbuja.- Es la temperatura a la cual un líquido forma la primera burbuja de vapor a presión constante en un proceso de evaporación.

Temperatura del punto de rocío.- Es la temperatura a la cual un vapor genera la primera gota de líquido a presión constante en un proceso de condensación.

Presión del punto de burbuja.- Es la presión a la cual se forma la primera burbuja de vapor a temperatura constante al descomprimir un líquido.

Presión del punto de rocío.- Es la presión a la cual un vapor genera la primera gota de líquido a temperatura constante en un proceso de condensación.

$$P_{pr} = \frac{1}{\frac{y_A}{P_A^*(T)} + \frac{y_B}{P_B^*(T)} + \frac{y_C}{P_C^*(T)} + \dots} \quad (3.19)$$

Vapor sobrecalentado.- se denomina vapor sobrecalentado cuando la presión parcial de un componente es menor que la presión de saturación del mismo componente, cumpliendo con la desigualdad $y_i P_T < P_i^*$.

Ejemplo 3.13 Punto de rocío y punto de burbuja

Una mezcla líquida que contiene 40% mol de benceno y el resto de tolueno, se encuentra en equilibrio con vapor a una presión de 1.2 atm. Determine la composición final de vapor y la temperatura a la cual se encuentra, luego analice si la temperatura calculada corresponde al punto de burbuja o al punto de rocío.

Solución

Benceno = Componente A

Tolueno = Componente B

$$1.2 \text{ atm} \times \frac{760 \text{ mm Hg}}{1 \text{ atm}} = 912 \text{ mm Hg}$$

$$P_T = \sum P_i$$

$$912 \text{ mm Hg} = x_A P_A^* @ T_{\text{ebu}} + x_B P_B^* @ T_{\text{ebu}}$$

Para encontrar las presiones de saturación o vapor de cada compuesto se procede a asumir un valor de temperatura arbitrario, debido a que es el valor desconocido que debemos determinar. Mediante un proceso de prueba y error hay que variar la temperatura del sistema hasta que la suma de las presiones de cada componente sume 912 mm Hg. Para realizar esta estimación, hay que usar la ecuación de Antoine y los valores de las constantes que se encuentran en el Apéndice A.5.

$$\ln(P^*) = A - \frac{B}{T + C}$$

La siguiente tabla presenta los valores arbitrarios de temperatura a los cuales se estimó las presiones de vapor de los componentes benceno y tolueno.

°C	K	x_A	P_A^* [mm Hg]	x_B	P_B^* [mm Hg]	P_T [mm Hg]
80	353.15	0.4	756.995	0.6	290.480	477.08
90	363.15	0.4	1020.158	0.6	405.808	651.54
100	373.15	0.4	1349.314	0.6	555.218	872.85
101.5	374.71	0.4	1406.016	0.6	582.022	911.6*

Análisis: Mediante el proceso de prueba-error variando los valores de la temperatura se obtiene una presión total de 911.6 mm Hg, por lo tanto, se asume que la temperatura del punto de ebullición es de 101.55 °C. Además, el ejercicio proporciona las composiciones líquidas, por tanto la temperatura que se ha calculado anteriormente es el punto de burbuja.

Nota: Si el ejercicio proporciona las composiciones de vapor de la mezcla, la temperatura que se calcula correspondería al punto de ebullición.

Para calcular las composiciones de vapor se usan las presiones parciales a la temperatura de ebullición (101.55°C).

Presión parcial de Benceno A

$$P_A = x_A P_A^*$$

$$P_A = (0.4)(1406.016 \text{ mm Hg})$$

$$P_A = 562.4064 \text{ mm Hg}$$

Presión parcial de Tolueno B

$$P_B = x_B P_B^*$$

$$P_B = (0.6)(582.022 \text{ mm Hg})$$

$$P_B = 349.213 \text{ mm Hg}$$

Fracciones molares de la fase gaseosa

$$y_A = \frac{P_A}{P_T} = \frac{562.4066 \text{ mmHg}}{912 \text{ mm Hg}} = 0.617$$

$$y_B = 1 - y_A = 1 - 0.617 = 0.383$$

3.5 Solución Bifásica entre Líquidos

Cuando una mezcla líquida es heterogénea, se utiliza un proceso de decantación que separa a la mezcla en relación a las densidades de cada componente de la mezcla. Por otro lado, cuando una mezcla líquida es homogénea, la separación se produce mediante la variación de temperatura o presión hasta alcanzar condiciones de evaporación de uno de los componentes de la mezcla. El proceso de recuperación de metanol es un ejemplo de separación de líquidos; el metanol suele retirarse de una mezcla acuosa luego de haber participado como un solvente o reactivo; además presenta una temperatura de ebullición menor en comparación con el agua, es decir, tiende a evaporarse con mayor facilidad cuando se eleva la temperatura; para recuperar el metanol se usa un proceso de destilación que separara en dos corriente al agua y el metanol. La corriente de cabeza está formado por un vapor rico en metanol mientras que la corriente de fondo presenta un líquido rico en agua.

3.6 Solución Bifásica: Sólidos en Líquidos

La concentración de una solución se mide por la cantidad de soluto disuelto en un disolvente. En mezclas sólido-líquido la **solubilidad** es la cantidad

máxima con la que un sólido llega a disolverse en un líquido hasta llegar al equilibrio. Esta propiedad depende del tipo de disolvente y el tipo de soluto sólido, es decir, sería un error comparar la disolución de cierta cantidad de NaCl en agua que con AgNO_3 también en agua, a pesar de tratarse del mismo disolvente la solubilidad de ambos compuestos será distinta. Además la solubilidad es directamente proporcional a la temperatura. Cuando el solvente contiene la cantidad máxima de soluto disuelto en equilibrio se habla de una solución saturada. El sistema de solución sólido- líquido alcanza el equilibrio cuando está saturado.

El proceso de cristalización se produce cuando una solución saturada se enfría, generando cristales de soluto que al ser retirados del sistema reducen la solubilidad de la solución. La cristalización es un proceso que se desarrolla en un tiempo considerable, a medida que se reduce la temperatura se forman cristales; los cristales retirados sobresaturaban la solución a una temperatura determinada. En otras palabras, la sobresaturación es la diferencia entre la solubilidad a una temperatura cualquiera y la solubilidad de equilibrio. Para procesos de separación sólido-líquido se considera el equilibrio del sistema.

Ejemplo 3.14 Separación de fases sólida y líquida

El nitrato de plata es una sal inorgánica utilizada principalmente como material precipitante de halógenos mediante el método Mohr, la sal presenta un alto valor de solubilidad en agua, lo cual le permite interactuar con cualquier anión disuelto en un medio acuoso. La solubilidad del compuesto de nitrato de plata en 100 g de agua varía de 222 g a 20 °C hasta 952 g a 100 °C. Un análisis de determinación de cloro disuelto dejó como resultado 300 kilogramos de solución acuosa saturada con AgNO_3 a 100 °C. Se requiere recuperar la sal inorgánica

en forma de cristales reduciendo la temperatura a 20 °C, esto genera una torta húmeda formada por 75% de cristales y 25% de solución saturada. La torta ingresa a un secador que se encarga de retirar el agua restante. ¿Qué fracción de nitrato de plata se recupera en el proceso? ¿Cuál es la cantidad de agua eliminada en el secador?

Datos adicionales presentes en el diagrama de flujo

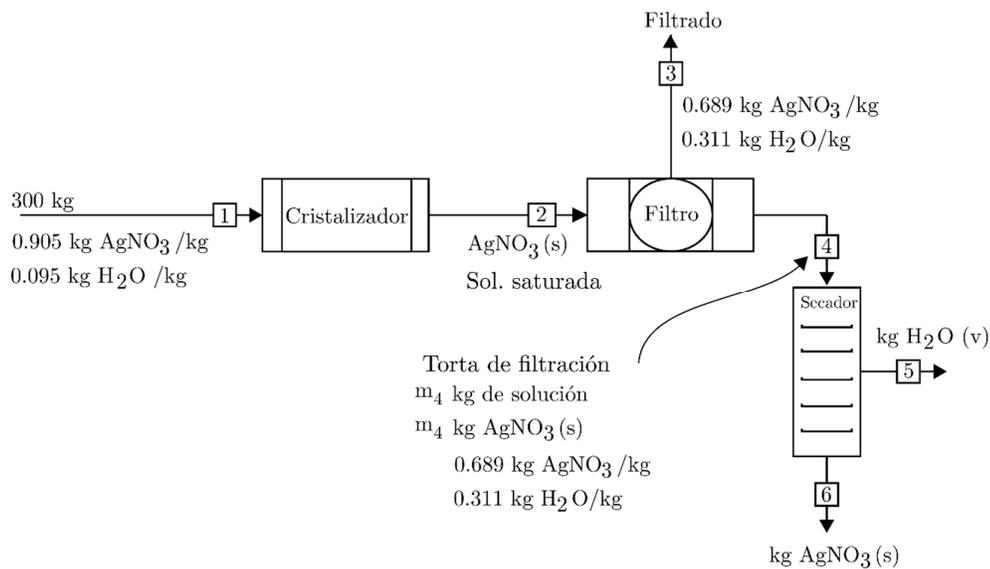


FIGURA DEL EJEMPLO 3.14.1

Diagrama de flujo para la obtención de cristales de nitrato de plata.

Solución

Determinar la solubilidad a la temperatura inicial y final

Temperatura inicial 100 °C

952 kg AgNO₃ de soluto

100 kg H₂O de solvente

1052 kg totales solución

$$\frac{952 \text{ kg AgNO}_3}{1052 \text{ kg totales}} = 0.905 \frac{\text{kg AgNO}_3}{\text{kg}}$$

$$1 - 0.905 \frac{\text{kg AgNO}_3}{\text{kg}} = 0.095 \frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}}$$

Temperatura final 20 °C

222 kg AgNO₃ de soluto

100 kg H₂O de solvente

322 kg totales solución

$$\frac{222 \text{ kg AgNO}_3}{322 \text{ kg totales}} = 0.689 \frac{\text{kg AgNO}_3}{\text{kg}}$$

$$1 - 0.689 \frac{\text{kg AgNO}_3}{\text{kg}} = 0.311 \frac{\text{kg H}_2\text{O}}{\text{kg}}$$

Balance de materia en el cristizador y filtrado

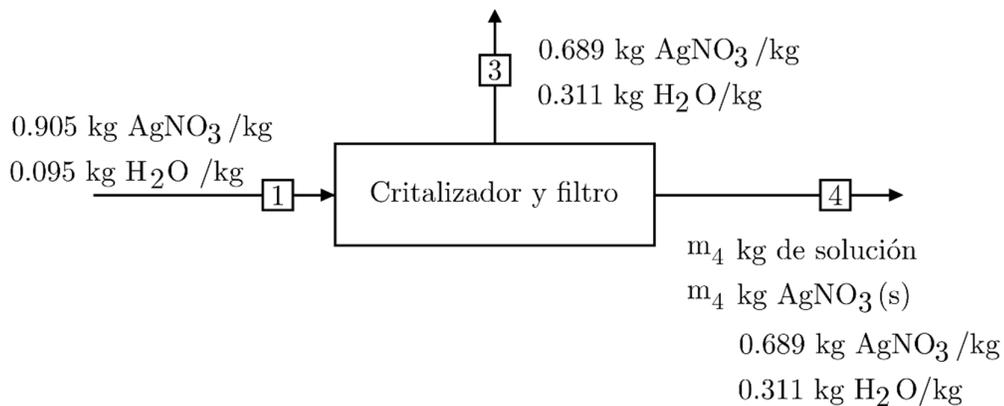


FIGURA DEL EJEMPLO 3.14.2

Diagrama de balance en torno al cristizador y filtro

Balance general

$$300 \text{ kg} = m_3 + m_{4_{\text{solución}}} + m_{4_{\text{AgNO}_3}} \quad (\text{i})$$

Composición de la torta de húmeda

$$m_{4_{\text{AgNO}_3}} = 0.75 (m_{4_{\text{solución}}} + m_{4_{\text{AgNO}_3}})$$

$$m_{4\text{AgNO}_3} - 0.75 m_{4\text{AgNO}_3} = 0.75 m_{4\text{solución}}$$

$$m_{4\text{solución}} = \frac{0.25 m_{4\text{AgNO}_3}}{0.75} \quad (\text{ii})$$

Balance del H₂O

$$0.095 \times 300 \text{ kg} = 0.311m_3 + 0.311m_{4\text{solución}} \quad (\text{iii})$$

Reemplazo la ecuación (ii) en (iii) y (i)

$$28.5 \text{ kg} = 0.311m_3 + 0.311 \left(\frac{0.25 m_{4\text{AgNO}_3}}{0.75} \right) \quad (\text{iv})$$

$$300 \text{ kg} = m_3 + \frac{0.25 m_{4\text{AgNO}_3}}{0.75} + m_{4\text{AgNO}_3} \quad (\text{v})$$

Despejar a m₃ de la ecuación (iv)

$$m_3 = \frac{0.095 \times 300 \text{ kg} - 0.311 \left(\frac{0.25 m_{4\text{AgNO}_3}}{0.75} \right)}{0.311}$$

Reemplazar m₃ en la ecuación (v)

$$300 = \frac{28.5 - 0.311 \left(\frac{0.25 m_{4\text{AgNO}_3}}{0.75} \right)}{0.311} + \frac{0.25 m_{4\text{AgNO}_3}}{0.75} + m_{4\text{AgNO}_3}$$

$$m_{4\text{AgNO}_3} = 208.36 \text{ kg}$$

$$m_3 = \frac{0.095 \times 300 \text{ kg} - 0.311 \left(\frac{0.25 \times 208.36 \text{ kg}}{0.75} \right)}{0.311}$$

$$m_3 = 22.19 \text{ kg}$$

$$m_{4\text{solución}} = \frac{0.25 (208.36 \text{ kg})}{0.75}$$

$$m_{4\text{solución}} = 69.5 \text{ kg}$$

Balance de materia global

Balance de AgNO_3 (cristales)

$$0.905m_1 = 0.689 m_3 + m_6$$

$$0.905(300) = 0.689 (22.19) + m_6$$

$$m_6 = 256.21 \text{ kg AgNO}_3$$

Porcentaje de recuperación

$$\frac{256.21 \text{ kg AgNO}_3}{(0.905 \times 300) \text{ kg AgNO}_3} \times 100 = 94.37 \%$$

Para determinar la cantidad de agua retirada es necesario un balance global

$$m_1 = m_3 + m_5 + m_6$$

$$300 \text{ kg} = 22.19 \text{ kg} + m_5 + 256.21 \text{ kg}$$

$$m_5 = 21.6 \text{ kg de H}_2\text{O}$$

Ejemplo 3.14 Balance de masa en un cristalizador

El compuesto de nitrato de potasio presenta una solubilidad moderada en un medio acuoso. La solubilidad de este compuesto se eleva cuando la temperatura aumenta, como se muestra en la figura del ejemplo en la curva correspondiente al nitrato de potasio. Una solución acuosa de 100 g está compuesta por 66% de KNO_3 y la diferencia de H_2O , ingresan a un cristalizador que reduce la temperatura de la solución desde 100°C a 50°C . Mediante el análisis de la gráfica, determine cuál es la temperatura a la que la solución se satura, y calcule la cantidad de cristales recuperados.

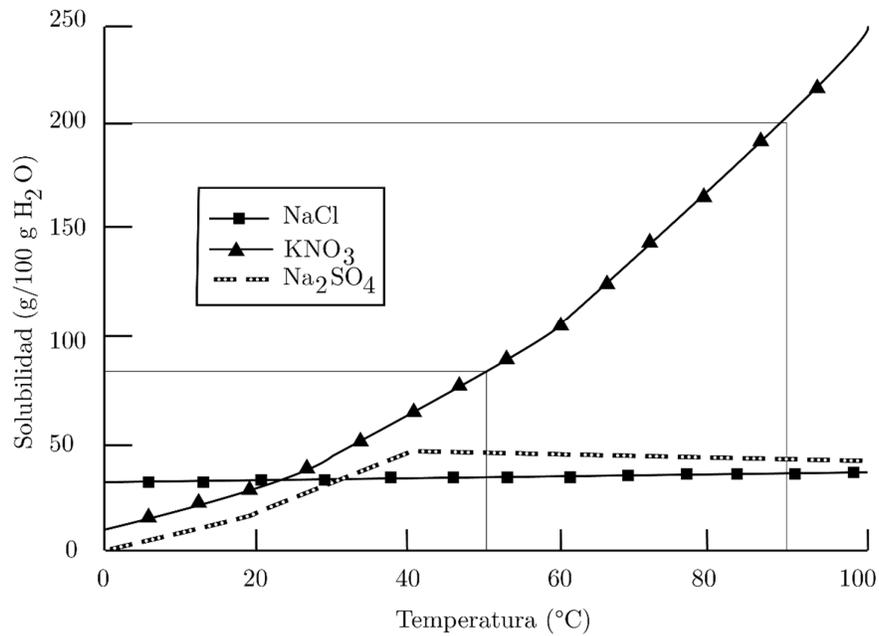


FIGURA DEL EJEMPLO 3.14.1

Diagrama de solubilidad de NaCl, KNO₃ y Na₂SO₄

Solución

Para determinar la solubilidad de la solución, es necesario obtener una relación entre el soluto y solvente y expresarlo en función de 100 g de H₂O de solvente para determinar la temperatura de saturación en la gráfica proporcionada.

$$\frac{66.6 \text{ kg KNO}_3}{33.3 \text{ kg H}_2\text{O}} = 2 \frac{\text{kg KNO}_3}{\text{kg H}_2\text{O}} = \frac{200 \text{ kg KNO}_3}{100 \text{ kg H}_2\text{O}}$$

Para la relación $\frac{200 \text{ g KNO}_3}{100 \text{ g H}_2\text{O}}$ la temperatura de saturación de la solución es 90°C.

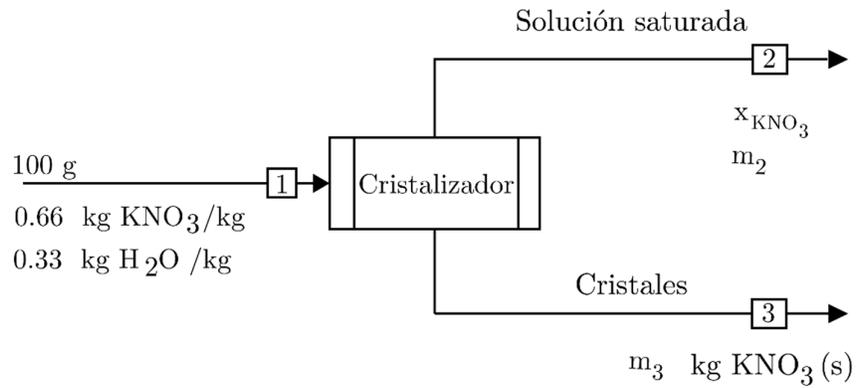


FIGURA DEL EJEMPLO 3.14.2

Diagrama de flujo del proceso de cristalización de KNO_3

Mediante el diagrama de solubilidad, es conveniente determinar la composición entre el soluto y 100 kg de agua a la temperatura a la que sale del cristalizador.

A 50°C , la solubilidad de la solución acuosa es $83 \text{ kg de KNO}_3/100 \text{ kg de H}_2\text{O}$, entonces:

$$x_{\text{KNO}_3} = \frac{83 \text{ kg KNO}_3}{83 \text{ kg KNO}_3 + 100 \text{ kg H}_2\text{O}} = 0.454$$

$$x_{\text{H}_2\text{O}} = 1 - x_{\text{KNO}_3} = 1 - 0.454 = 0.546$$

Balance de materia para el H_2O

$$m_1 y_{\text{H}_2\text{O}} = m_2 x_{\text{H}_2\text{O}}$$

$$100 \text{ kg} \times 0.33 = m_2 \times 0.546$$

$$m_2 = 60.44 \text{ kg}$$

Balance global del sistema

$$m_1 = m_2 + m_3$$

$$100 \text{ kg} = 60.44 \text{ kg} + m_3$$

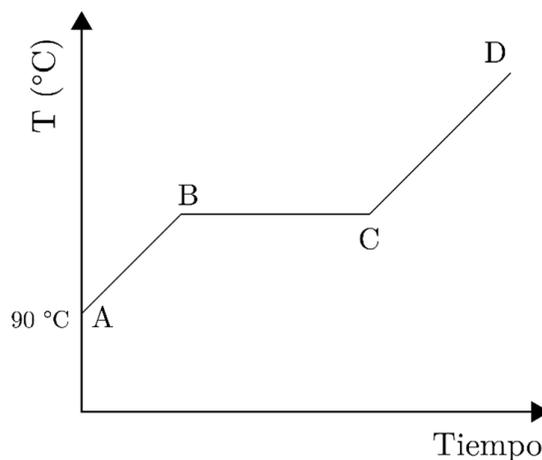
$$m_3 = 39.56 \text{ kg KNO}_3(\text{s})$$

Porcentaje de cristalización del nitrato de potasio.

$$\frac{\text{Cristalizado}}{\text{Alimentado}} \times 100\% = \frac{39.56 \text{ kg KNO}_3}{66 \text{ kg KNO}_3} \times 100 = 59.94 \%$$

Ejercicios Propuestos

- En un cilindro con un pistón móvil e isobárico, se calienta amoníaco desde 90°C a 2 atm, el comportamiento del compuesto es descrito mediante la gráfica presentada, determinar la temperatura e identificar que ocurre en cada tramo.



- Mediante experimentación en un recipiente se logra determinar la presión de vapor del componente metano a diversas temperaturas, dichos valores se presenta en la siguiente tabla:

T($^\circ\text{C}$)	80.5	110.8	115.0	131.7	168.3	196.3
P*(mm Hg)	4.0	15.0	40.0	102.00	420.0	755.0

Mediante el uso de la ecuación de Clausius- Clapeyron realice una gráfica semilogarítmica para permita establecer una ecuación para determinar una P^* (mm Hg) en función de T ($^\circ\text{C}$). Luego con ayuda de la gráfica y las ecuaciones correspondientes determine el calor de vaporización del metano en kJ/mol.

- Por medio de los métodos estudiados determine la presión de vapor del etilenglicol a 75 °C.
 - a) Ecuación de Clausius- Clapeyron
 - b) Aplicando el uso del diagrama de Cox
 - c) Mediante el uso de las constantes de Antoine presentados en el Apéndice A.5.
- Determinar el error asociado a la ecuación de Antonie, si el punto de ebullición normal para la acetona es de 56°C a 760 mmHg, las constantes de Antonie para la acetona en mmHg son $A=7.2316$, $B=1277,03$ y $C=237.24$
- Determinar el calor latente de vaporización del etilenglicol si la presión de saturación a 314 K es de 46.6 mmHg y a 315 K es de 62 mmHg y además estime el parámetro beta de la ecuación de Clausius-Clapeyron si la temperatura es de 56°C.
- Determinar la presión de vapor y el calor latente de vaporización del Metilciclopentano a 400 K, si la presión de vapor es de 790 mmHg a 267 K.
- La presión de vapor del 1,2-dicloroetano puro en función de la temperatura es de 405.33 mmhg a 78°C y de 1415.81 kPa a 115°C, determine la presión de vapor a 100°C utilizando la ecuación de Clausius-Clapeyron.
- Determinar la cantidad molar de cierto solvente orgánico, que se encuentra contenido dentro de un matraz a 33°C permitiendo la coexistencia del estado líquido y vapor; el solvente contiene un volumen de 100 ml de vapor en líquido, Mediante procesos experimentales se logró determinar que la presión de vapor del solvente es de 40 mm Hg a 23°C y 180 mm Hg a 42°C.

- El metano también conocido como gas natural, se somete a un enfriamiento desde 70°C a 20°C a presión constante de 3 atm con una humedad relativa de 40%
 - a) A la temperatura inicial determine la temperatura en el punto de rocío y de grados de sobrecalentamiento.
 - b) Si al gas lo encerramos en una cámara a volumen variable con presión constante y además suponiendo un comportamiento ideal, ¿Qué presión de saturación necesita para que se forme condensado en las paredes de la cámara a 75°C.
- Un grupo de investigadores de la industria petroquímica busca reducir la cantidad de vapor de CS₂ contenido en una cantidad de metano. La mezcla tiene una presión total constante de 800 mmHg. Estos dos componentes están en cierta proporción que hace que a 45°C la saturación sea del 70%. La alternativa que proponen es enfriar la mezcla para reducir un 55% volumen del CS₂, es decir, aplicar un proceso de condensación. La presión de vapor del componente que pretende ser retirado varía en función de la siguiente relación:

$$P^* = 15.4 \times T(^{\circ}\text{C}) + 130$$

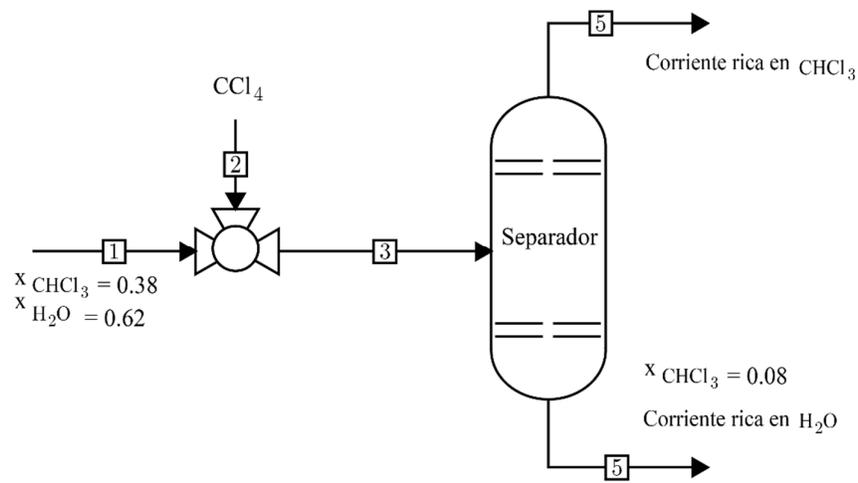
- Cierta día ocurre una falla en el proceso de producción de tolueno genera que algunos gases provenientes de la quema de hidrocarburos se mezclen a condiciones de ambiente con el producto del proceso y el aire, alcanzando una presión total de 700 mmHg. Cuando esto ocurre la presión parcial del tolueno alcance los 3.3 mmHg. Buscando evitar que se produzca una mayor contaminación en el sitio, se determinan las siguientes condiciones:
 - a) Los gramos de tolueno por metro cúbico
 - b) Composición molar del vapor de tolueno en el gas
 - c) Composición molar de tolueno en el gas sin tolueno

d) Valor y porcentaje de saturación relativa

- Si a un frasco totalmente cerrado a presión ambiente alimentamos aire húmedo con 34% de vapor de agua , lo dejamos enfriar de 186°C a 13°C, determinar la presión al final del proceso de enfriamiento ignorando el volumen de condensado que se puede formar en las paredes del vaso, también determinar la fracción de agua en la etapa gaseosa al final del proceso y la cantidad total de agua que se condensara asegurando que la presión total del sistema será igual a la suma de la presión del aire y del agua. Determinar el tiempo en el que se evapora toda el agua contenida en 100 litros de agua a la cual se le burbujea aire totalmente seco a razón de 7 litros por minuto, el aire que sale está a condiciones normales de presión y temperatura.
- Una planta de producción de amoníaco obtiene una mezcla de gases con composiciones molares de 0.2 de nitrógeno, 0.5 de hidrógeno, 0.2 de amoníaco, 0.04 de argón y 0.06 de metano, la mezcla ingresa a un condensador que opera a -28 °F y 2020 psia, en base a los datos proporcionados determine las composiciones de las corrientes líquida y vapor si al condensador ingresan 300 lbmol. Para la resolución de este problema, considere el equilibrio entre las fases, y relaciónelas con la respectiva constante de equilibrio mostrada en la tabla.

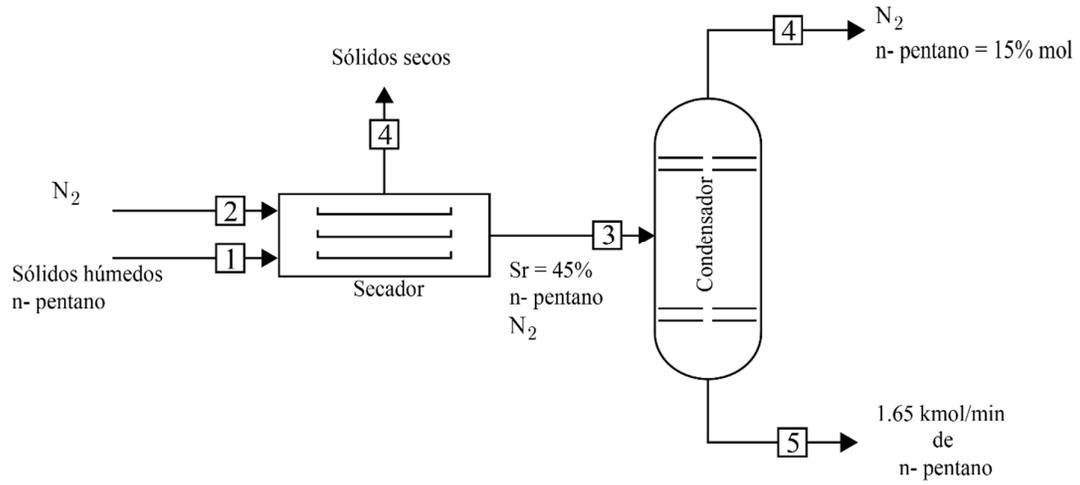
Compuesto	Constante de equilibrio entre fases (k)
Nitrógeno	66.67
Hidrógeno	50
Argón	100
Metano	33.33
Amoníaco	0.015

- En primera instancia se alimenta a un mezclador una solución que tiene 38% de cloroformo en agua con una corriente de tetracloruro de carbono, después la mezcla resultante se envía a un decantador que se encuentra a 35°C y se forman dos fases, suponiendo que los compuestos alcanzan el equilibrio, determinar la cantidad de tetracloruro de carbono si se desea reducir la concentración de la fase rica en agua del cloroformo al 8%.



- El nitrógeno a altas temperaturas en la industria petroquímica es usado para secar o reducir la cantidad de agua presente en ciertos alcanos, el n-pentano corriente 1 se pone en contacto con nitrógeno corriente 2 en un secador en donde salen dos corrientes, la corriente 3 sale a 120 °C con un 45% de humedad relativa (Sr) a presión constante de 1 atm, mientras que la corriente 4 contiene sólidos secos. La corriente 3 es enviada a un condensador en donde se obtendrá 15% mol de n-pentano, si el condensado se recupera a razón de 1.65 kmol/min determinar la temperatura a la cual se deberá enfriar el gas, calcular el flujo requerido de nitrógeno para la alimentación del secador. Ahora, manteniendo las mismas condiciones comprimir y elevar la temperatura de la mezcla que sale del secador hasta 15 atm, determinar la temperatura a la cual se deberá enfriar el gas y el

flujo requerido de nitrógeno para la alimentación del secador, compare los resultados y establezca cual proceso es más efectivo en relación con el costo.



Referencias

- Delgado Linares, J. G., Delgado Linares, G. A., & Mercado Ojeda, R. A. (2009). Balances de masa y energía simplificados, aplicados a un proceso de craqueo catalítico de petróleo. *Educación Química*, 20 (4), 456–460. [https://doi.org/10.1016/s0187-893x\(18\)30050-8](https://doi.org/10.1016/s0187-893x(18)30050-8)
- Felder, R., & Rousseau, R. (2004). *Principios elementales de los procesos químicos*. (3ra ed.). Limusa Wiley.
- Foust A., Wenzel L., Clump C., Maus, L., Bryce, L. A., (1987). *Principios de operaciones Unitarias*. Compañía editorial continental.
- Ghasem, N., & Henda, R. (2014). *Principles of chemical engineering processes: Material and energy balances*. CRC Press. <https://doi.org/10.1201/b17696>
- Hougen O. A., Watson K. M. y Ragatz R. A., *Chemical Process Principles* (2° ed.) John Wiley & Sons.
- McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriot, P. (2007). *Operaciones unitarias en ingeniería química*. (7ma ed.). McGraw-Hill.
- Monsalvo, R., Miranda, Ma. G., Romero, Ma. del R., Muñoz, G.(2014). *Balance de materia y energía: Procesos industriales*. Grupo editorial Patria
- Reid R. C., Prausnitz J. M., y Poling B. E., *The Properties of Gases and liquids*, (4a. ed.). McGraw-Hill.
- Veverka V. , F. M. (1997). *Material and Energy Balancing in the Process Industries: From Microscopic Balances to Large Plants* (L. M. Rose (ed.)). Elsevier Science B.V.

Apéndices

Los apéndices presentados en este trabajo facilitan la búsqueda de información experimental establecida necesaria. El apéndice A.1 muestra posibles variaciones del análisis dimensional de la constante de gases. El apéndice A.2, presenta valores de propiedades físicas, así como también valores tabulados experimentalmente de entalpías de vaporización, temperaturas y presiones críticas entre otras. El apéndice A.3, indica valores específicos de factor acéntrico de Pitzer y el factor de compresibilidad en el caso de que un componente del listado no tenga comportamiento ideal. Para el estudio de la determinación de las presiones de vapor, ecuación de Antoine y hasta análisis de la solubilidad y constante de Henry presentado en el capítulo 2 y 3 se presentan los apéndices A.4, A.5 y A.7. Todos los datos mostrados han sido tomados de las siguientes referencias:

Felder, R., & Rousseau, R. (2004). *Principios elementales de los procesos químicos*. (3ra ed.). Limusa Wiley.

Perry R., Green D. W. (1997). *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, (8va ed.) McGraw-Hill Companies.

Himmelblau David. (1997). *Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química* (6ta ed.). University of Texas.

Apéndice A.1

Constante universal de los gases (R) a distintas unidades

Valor	Unidades
8.2057×10^{-5}	atm · m ³ /mol · K
8.3145×10^{-5}	bar · m ³ /mol · K
5.8200×10^{-4}	kW · h/lbmol · R
7.8047×10^{-4}	HP · h/lbmol · R
2.3096×10^{-3}	kW · h/kmol · K
0.062364	mmHg · m ³ /mol · K
0.082057	atm · L/mol · K atm · m ³ /kmol · K
0.083145	bar · L/mol · K bar · m ³ /kmol · K
0.084755	(kgf/cm ²) · L/mol · K
0.73024	atm · ft ³ /lbmol · R
1.9872	cal/mol · K kcal/kmol · K BTU/lbmol · R
1.3144	atm · pie ³ /lbmol · K
8.3145	J/mol · K kJ/kmol · K Pa · m ³ /mol · K kPa · m ³ /kmol · K MPa · cm ³ /mol · K
10.728	psia · ft ³ /lbmol · R (lb/in ²) · ft ³ /lbmol · R
21.85	inHg · ft ³ /lbmol · R
62.364	mmHg · L/mol · K Torr · L/mol · K
82.057	atm · cm ³ /mol · K atm · L/kmol · K
83.145	bar · cm ³ /mol · K mbar · L/mol · K hPa · m ³ /kmol · K
554.98	mmHg · ft ³ /lbmol · R Torr · ft ³ /lbmol · R

Apéndice A.1 (continúa)

Constante universal de los gases (R) a distintas unidades

Valor	Unidades
1544.8	(lb/ft ²) · ft ³ /lbmol · R lb · ft/lbmol · R
62364	mmHg · cm ³ /mol · K Torr · cm ³ /mol · K
8.3145 × 10 ⁷	erg/mol · K

Apéndice A.2

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Compuesto	Fórmula	Peso molecular	GE	T _m (°C)	$\Delta\widehat{H}_m$ (T _m) kJ/mol	T _b (°C)	$\Delta\widehat{H}_v$ (T _b) kJ/mol	T _c (°C)	P _c (atm)	$\Delta\widehat{H}_f^0$ kJ/mol	$\Delta\widehat{H}_c^0$ kJ/mol
Acetaldehído	CH ₃ CHO	44.05	0.783	-123.7		20.2	25.1	461		-166.2(g)	-1192.4(g)
Acetato de etilo	C ₃ H ₈ O ₂	88.1	0.901	-83.8		77.0		523.1	37.8	-463.2(l)	-2246.4(l)
Acetato de metilo	C ₃ H ₆ O ₂	74.08	0.933	-98.9		57.1		506.7	46.30	-426.8(g)	-1595(l)
Acetileno	C ₂ H ₂	26.04				-81.5	17.6	309.5	61.6	-409.4(l)	-1299.6(g)
Acetona	C ₃ H ₆ O	58.08	0.791	-95.0	5.69	56.0	30.2	508.0	47.0	226.75(g)	-1785.7(l)
Ácido acético	CH ₃ COOH	60.05	1.049	16.6	12.09	118.2	24.39	594.8	57.1	-248.2(l)	-1821.4(l)
Ácido benzoico	C ₇ H ₆ O ₂	122.12	1.266	122.2		249.8				-486.18(l)	-871.69(l)
Ácido fórmico	CH ₂ O ₂	46.03	1.220	8.30	12.68	100.5	22.25			-438.15(g)	-919.73(g)
Ácido fosfórico	H ₃ PO ₄	98.00	1.834	42.3	10.54					-409.2(l)	-262.8(l)
Ácido nítrico	HNO ₃	63.02	1.502	-41.6	10.47	86	30.3			-1281.1(c)	
Ácido oxálico	C ₂ H ₂ O ₄	90.04	1.90							-1278.6(ac)	
Ácido sulfúrico	H ₂ SO ₄	98.08		10.35	9.87					-173.23(l)	
Agua	H ₂ O	18.016	1.00	0.00	6.0095	100.0				-206.57(ac)	
Alcohol bencílico	C ₇ H ₈ O	108.13	1.045	-15.4		205.2				-826.8(c)	-251.9(s)
Alcohol etílico (etanol)	C ₂ H ₅ OH	46.07	0.789	-114.6	5.021	78.5	38.58	516.3	63.0	-811.32(l)	
Alcohol isopropílico	C ₃ H ₅ OH	60.09	0.785	-89.7		82.24		508.8	53.0	-285.84(l)	-3741.8(l)
										-241.83(g)	-1366.9(l)
										-235.31(g)	-1409.25(g)
										-310.9(l)	-1986.6(l)

Apéndice A.2 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Compuesto	Fórmula	Peso molecular	GE	T _m (°C)	$\Delta\widehat{H}_m$ (T _m) kJ/mol	T _b (°C)	$\Delta\widehat{H}_v$ (T _b) kJ/mol	T _c (°C)	P _c (atm)	$\Delta\widehat{H}_f^0$ kJ/mol	$\Delta\widehat{H}_c^0$ kJ/mol
Alcohol metílico (metanol)	CH ₃ OH	32.04	0.792	-97.9	3.167	64.7	35.27	513.20	78.5	-238.6(l)	726.6(l)
										-201.2(g)	-764.0(g)
	C ₃ H ₅ OH	60.09	0.804	-127		97.04		536.7	50.0	-300.70(l)	-2010.4(l)
Alcohol n-propílico										-255.2(g)	-2068.5(g)
Amoníaco	NH ₃	17.03		-77.8	5.653	-33.43	23.351	405.5	111.3	-67.20(l)	
										-46.19(g)	-382.58(g)
Anilina	C ₆ H ₇ N	93.12	1.022	-6.3		184.2		699	52.4		
Azufre (monoclínico)	S ₈	256.53	1.96	119	14.17	444.6	83.7			0.3(c)	
Azufre (rómbo)	S ₈	256.53	2.07	113	10.04	444.6	83.7			0(c)	
Benceno	C ₆ H ₆	78.11	0.879	5.53	9.837	80.1	30.765	562.6	48.6	48.66(l)	-3267.6(l)
										82.93(g)	-3301.5(g)
Benzaldehído	C ₆ H ₅ CHO	106.12	1.046	-26.0		179.0	38.40			-88.83(l)	
										-40.04(g)	-3520.0(l)
Bicarbonato de sodio	NaHCO ₃	84.01	2.20							-945.6(c)	
Bisulfato de sodio	NaHSO ₃	120.07	2.742							-1126.3(c)	
Bromo	Br ₂	159.83	3.119	-7.4	10.8	58.6	31.0	584	102	0(l)	
Bromuro de etilo	C ₂ H ₅ Br	108.98	1.460	-119.1		38.2		504	61.5	-54.4(g)	
Bromuro de hidrógeno	HBr	80.92		-86		-67					-36.23(g)
1.2-butadieno	C ₄ H ₆	54.09		-136.5		10.1		446			
1.3-butadieno	C ₄ H ₆	54.09		-109.1		-4.6		425	42.7		

Apéndice A.2 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Compuesto	Fórmula	Peso molecular	GE	T _m (°C)	$\Delta\widehat{H}_m$ (T _m) kJ/mol	T _b (°C)	$\Delta\widehat{H}_v$ (T _b) kJ/mol	T _c (°C)	P _c (atm)	$\Delta\widehat{H}_f^0$ kJ/mol	$\Delta\widehat{H}_c^0$ kJ/mol
<i>n</i> -butano	C ₄ H ₁₀	58.12		-138.3	4.661	-0.6	22.305	425.17	37.47	-147.0(l) -127.7(g)	-2855.6(l) -2878.5(g)
1-Buteno	C ₄ H ₈	56.10		-185.3	3.848	-6.25	21.916	419.6	39.7	1.17(g)	-2718.6(g)
Carbonato de calcio	CaCO ₃	100.09	2.93							-1206.9(c)	
Carbonato de sodio	Na ₂ CO ₃	105.99	2.533							-1130.9(c)	
Carbono (grafito)	C	12.010	2.26	3600	46.0	4200				0(c)	-393.51(c)
Carburo de calcio	CaC ₂	64.10		2300						-62.7(c)	
Cianuro de hidrógeno	HCN	27.03		-14		26				130.54(g)	
Cianuro de sodio	NaCN	49.01		562	16.7	1497	155			-89.79(c)	
Ciclohexano	C ₆ H ₁₂	84.16	0.779	6.7	2.677	80.7	30.1	553.7	40.4	-156.2(l) 123.1(l)	-3919.9(l) -3953.0(g)
Ciclopentano	C ₅ H ₁₀	70.13	0.745	-93.4	0.609	49.3	27.30	511.8	44.55	-105.9(l) -77.2(g)	-3290.9(l) -3319.5(g)
Cinc	Zn	65.38	7.140	419.5	6.674	907	114.77			0(c)	
Cloro	Cl ₂	70.91		-101.00	6.406	-34.06	20.4	417.0	76.1	0(c)	
Clorobenceno	C ₆ H ₅ Cl	112.56	1.107	-45		132.10	36.5	632.4	44.6		
Cloroetano	C ₂ H ₅ Cl	Ver cloruro de etilo									
Cloroformo	CHCl ₃	119.39	1.489	-63.7		61.0		536.0	54.0	-131.8(l)	-373(l)
Cloruro de calcio	CaCl ₂	110.99	2.15	782	28.37	>1600				-794.96(c)	
Etilénglicol	C ₂ H ₆ O ₂	62.07	1.113	-13	11.23	197.2	56.9			-451.5(l)	-1179.5(l)
Etileno	C ₂ H ₄	28.05		-169.2	3.350	-103.7	13.54	283.1	50.5	52.28(l)	-1410.9(l)
Fenol	C ₆ H ₅ OH	94.11	1.071	42.5	11.43	181.4		692.1	60.5	-158.1(s)	-3063.5(l)

Apéndice A.2 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Compuesto	Fórmula	Peso molecular	GE	T _m (°C)	$\Delta\widehat{H}_m$ (T _m) kJ/mol	T _b (°C)	$\Delta\widehat{H}_v$ (T _b) kJ/mol	T _c (°C)	P _c (atm)	$\Delta\widehat{H}_f^0$ kJ/mol	$\Delta\widehat{H}_c^0$ kJ/mol
Fluoruro de hidrógeno	HF	20.0		-83		20		503.2		-268.6(l) -316.9(ac)	
Formaldehído	H ₂ CO	30.03		-92		-19.3	24.48			-115.90(g)	-563.46(g)
Fosfato de calcio	Ca ₃ (PO ₄) ₂	310.19	3.14	1670						-4138(c)	
Fósforo (blanco)	P ₄	123.9	1.82	44.2	2.51	280	49.71				
Fósforo (rojo)	P ₄	123.9	2.20	590	81.17						-17.6(c)
Glicerol	C ₃ H ₈ O ₃	92.09	1.26	18.20	18.3	290.0				-665.9(l)	-1661.1(l)
Helio	He	4.00		-269.7	0.02	-268.9	0.084	5.26	2.26	0(g)	
<i>n</i> -Heptano	C ₇ H ₁₆	100.20	0.684	-90.59	14.03	98.43	31.69	540.2	27.0	-224.4(l) -187.8(g)	-4816.9(l) -4853.5(g)
<i>n</i> -Hexano	C ₆ H ₁₄	86.17	0.659	-95.32	13.03	68.74	28.85	507.9	29.9	-198.8(l) -167.2(g)	-4163.1(l) -4194.8(g)
Hidrógeno	H ₂	2.016		-259.19	0.12	-252.76	0.904	33.3	12.8	0(g)	-285.84(g)
Hierro	Fe	55.85	7.7	1535	15.1	2800	354.0			0(c)	
Hidróxido de amonio	NH ₄ OH	35.03								-366.48(ac)	
Hidróxido de calcio	Ca(OH) ₂	74.10	2.24							-986.59(c)	
Hidróxido de magnesio	Mg(OH) ₂	58.43	2.4								
Hidróxido de sodio	NaOH	40.00	2.130	319	8.34	1390				-426.6(c) -469.4(ac)	
Isobutano	C ₄ H ₁₀	58.12		-159.6	4.540	-11.73	21.292	408.1	36.0	-158.4(l) -134.5(g)	-2849.0(l) -2868.8(g)

Apéndice A.2 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Compuesto	Fórmula	Peso molecular	GE	T _m (°C)	$\Delta\widehat{H}_m$ (T _m) kJ/mol	T _b (°C)	$\Delta\widehat{H}_v$ (T _b) kJ/mol	T _c (°C)	P _c (atm)	$\Delta\widehat{H}_f^0$ kJ/mol	$\Delta\widehat{H}_c^0$ kJ/mol
Isopentano	C ₅ H ₁₂	72.15	0.62	-160.1		27.7		461.00	32.9	-179.3(l) -152.0(g)	-3507.5(l) -3529.2(g)
Magnesio	Mg	24.32	1.74	650	9.2	1120	131.8			0(c)	
	Hg		13.54								
Mercurio		200.61	6	-38.87		-356.9				0(c)	
Metano	CH ₄	16.04		-182.5	0.94	-161.5	8.179	190.70	45.8	-74.85(g)	-890.36(g)
Metil amina	CH ₅ N	31.06		-92.7		-6.9		429.9	73.60	-28.0(l)	-1071.5(l)
Metil etil cetona	C ₄ H ₈ O	72.1	0.805	-87.1		78.2	32.0				-2436(l)
Monóxido de carbono	CO	28.01		-205.1	0.837	-191.5	6.042	133.0	34.5	-110.52(g)	-282.99(g)
Naftaleno	C ₁₀ H ₈	128.16	1.145	80.0		217.8					-5157(g)
Níquel	Ni	58.69	8.90	1452		2900				0(c)	
Nitrato de amonio	NH ₄ NO ₃	80.05	1.725	169.6	5.4					-365.14(c) -399.36(ac)	
Nitrato de sodio	NaNO ₃	85.00	2.257	310	15.9					-466.7(c)	
Nitrito de sodio	NaNO ₂	69.00	2.168	271						-359.4(c)	
Nitrobenzeno	C ₆ H ₅ O ₂ N	123.11	1.203	5.5		210.7					-3092.8(l)
Nitrógeno	N ₂	28.02		-210.0	0.720	-195.8	5.577	126.20	33.5	0(g)	
n-Nonano	C ₉ H ₂ O	128.25	0.718	-53.8		150.6		595	23.0	-229.0(l)	-6124.5(l) -6171.0(g)
n-Octano	C ₈ H ₁₈	114.22	0.703	-57.0		125.5		568.8	24.5	-249.9(l) -208.4(g)	-5470.7(l) -5512.2(g)
Óxido de calcio	CaO	56.08	3.32	2570	50	2850				-635.6(c)	
Óxido de magnesio	MgO	40.32	3.65	2900	77.4	3600				-601.8(c)	

Apéndice A.2 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Compuesto	Fórmula	Peso molecular	GE	T _m (°C)	$\Delta\widehat{H}_m(T_m)$ kJ/mol	T _b (°C)	$\Delta\widehat{H}_v(T_b)$ kJ/mol	T _c (°C)	P _c (atm)	$\Delta\widehat{H}_f^0$ kJ/mol	$\Delta\widehat{H}_c^0$ kJ/mol
Óxido de plomo	PbO	223.21	9.5	886	11.7	1472	213			-219.2(c)	
Óxido férrico	Fe ₂ O ₃	159.70	5.12							-822.2(c)	
Óxido ferroso	FeO	71.85	5.7							-266.5(c)	
	NO					-					
Óxido nítrico		30.01		-163.6	2.301	151.8	13.78	179.20	65.0	90.37(g)	
Óxido nitroso	N ₂ O	44.02	1.226	-91.1		-88.8		309.5	71.70	81.5(g)	
Oxígeno	O ₂	32.00		-218.75	0.444	-182.97	6.82	154.4	49.7	0(g)	
	C ₅ H ₁₂	72.15	0.63	-129.6	8.393	36.07	25.77	469.80	33.3	-173.0(l)	-3509.5(l)
<i>n</i> -Pentano										-146.4(g)	-3536.1(g)
1-Penteno	C ₅ H ₁₀	70.13	0.641	-165.2	4.94	29.97		474	39.9	-20.9(g)	-3375.8(g)
Pentóxido de fósforo	P ₂ O ₅	141.95	2.387							-1506.2(c)	
Pentóxido de nitrógeno	N ₂ O ₅	108.20	1.63	30		47					
Plomo	Pb	207.21	11.337	327.4	5.10	1750	179.9			0(c)	
Propano	C ₃ H ₈	44.09		-187.69	3.52	-42.07	18.77	369.9	42.0	-119.8(l)	-2204.0(l)
										-103.8(g)	2220.0(g)
	C ₉ H ₁₂	120.19	0.862	-99.50	8.54	159.2	38.24	638.7	31.3	-38.40(l)	-5218.2(l)
<i>n</i> -Propil-benceno										7.82(g)	-5264.48(g)
Propileno	C ₃ H ₆	42.08		-185.2	3.00	-47.70	18.42	365.1	45.4	20.41(g)	-2058.4(g)
Silicato de calcio	CaSiO ₃	116.17	2.915	1530	48.62					1584(c)	
Sulfato cúprico	CuSO ₄	159.61	3.606							-769.9(c)	
										-843.1(ac)	

Apéndice A.2 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Compuesto	Fórmula	Peso molecular	GE	T _m (°C)	$\Delta\widehat{H}_m$ (T _m) kJ/mol	T _b (°C)	$\Delta\widehat{H}_v$ (T _b) kJ/mol	T _c (°C)	P _c (atm)	$\Delta\widehat{H}_f^0$ kJ/mol	$\Delta\widehat{H}_c^0$ kJ/mol
Sulfato de amonio	(NH ₄) ₂ SO ₄	132.14	1.769	513						-1179.3(c)	
Sulfato de calcio	CaSO ₄	136.15	2.69							-1173.1(ac)	
Sulfato de calcio (yeso)	CaSO ₄ ·2H ₂ O	172.18	2.32							-1432.7(c)	
Sulfato de sodio	NaSO ₄	142.05	2.698	890	24.3					-1384.5(c)	
Sulfito de sodio	Na ₂ SO ₃	126.05	2.633							-1090.3(c)	
Sulfuro de hidrógeno	H ₂ S	34.08		-85.5	2.38	-60.3	18.67	373.6	88.9	-19.96(g)	-562.59(g)
Sulfuro de sodio	Na ₂ S	78.05	1.856	950	6.7					-373.2(c)	
Sulfuro ferroso	FeS	87.92	4.84	1193						-95.1(c)	
Tetracloruro de carbono	CCl ₄	153.84	1.595	-22.9	2.51	76.7	30.0	556.4	45.0	-139.5(l)	-352.2(l)
Tetróxido de nitrógeno	N ₂ O ₄	92.0	1.448	-9.5		21.1		431.0	99.0	-106.7(g)	-385.0(g)
Tiosulfato de sodio	Na ₂ S ₂ O ₃	158.11	1.667							9.3(g)	
Tolueno	C ₇ H ₈	92.13	0.866	-94.99	6.619	110.62	33.47	593.9	40.3	-1117.1(c)	
Trióxido de azufre	SO ₃	80.07		16.84	25.48	43.3	41.80	491.4	83.8	12.00(l)	-3909.9(l)
<i>m</i> -Xileno	C ₈ H ₁₀	106.16	0.864	-47.87	11.569	139.10	36.40	619	34.6	50.00(g)	-3947.9(g)
<i>o</i> -Xileno	C ₈ H ₁₀	106.16	0.880	-25.18	13.598	144.42	36.82	631.5	35.7	-395.18(g)	-4551.9(l)
										17.24(g)	-4594.5(g)
										-24.44(l)	-4552.9(l)
										18.99(g)	-4596.3(g)

Apéndice A.2 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Compuesto	Fórmula	Peso molecular	GE	T _m (°C)	$\Delta\widehat{H}_m(T_m)$ kJ/mol	T _b (°C)	$\Delta\widehat{H}_v(T_b)$ kJ/mol	T _c (°C)	P _c (atm)	$\Delta\widehat{H}_f^0$ kJ/mol	$\Delta\widehat{H}_c^0$ kJ/mol
<i>p</i> -Xileno	C ₈ H ₁₀	106.16	0.861	13.26	17.11	138.35	36.07	618	33.9	-24.43(l) 17.95(g)	-4552.91(l) -4595.2(g)
Yodo	I ₂	253.8	4.93	113.3		184.2		826.0		0(c)	

Apéndice A.3

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
1	Acetaldehído	C ₂ H ₄ O	0.221	0.2907
2	Acetamida	C ₂ H ₅ NO	0.224	0.421
3	Ácido acético	C ₂ H ₄ O ₂	0.208	0.4665
4	Anhídrido acético	C ₄ H ₆ O ₃	0.23	0.4535
5	Acetona	C ₃ H ₆ O	0.233	0.3065
6	Acetonitrilo	C ₂ H ₃ N	0.184	0.3379
7	Acetileno	C ₂ H ₂	0.268	0.1912
8	Acroleína	C ₃ H ₄ O	0.234	0.3198
9	Ácido acrílico	C ₃ H ₄ O ₂	0.23	0.5383
10	Acrilonitrilo	C ₃ H ₃ N	0.214	0.3498
11	Aire	Mixture	0.313	
12	Amoníaco	H ₃ N	0.242	0.2526
13	Anisol	C ₇ H ₈ O	0.267	0.3502
14	Argón	Ar	0.291	0
15	Benzamida	C ₇ H ₇ NO	0.255	0.5585
16	Benceno	C ₆ H ₆	0.268	0.2103
17	Bencenetirol	C ₆ H ₆ S	0.261	0.2628
18	Ácido benzoico	C ₇ H ₆ O ₂	0.246	0.6028
19	Benzonitrilo	C ₇ H ₅ N	0.227	0.3662
20	Benzofenona	C ₁₃ H ₁₀ O	0.276	0.5019
21	Alcohol de bencilo	C ₇ H ₈ O	0.279	0.3631
22	Éter de bencil etilo	C ₉ H ₁₂ O	0.25	0.4332
23	Bencil mercaptano	C ₇ H ₈ S	0.25	0.3126
24	Bifenilo	C ₁₂ H ₁₀	0.261	0.4029
25	Bromo	Br ₂	0.286	0.129
26	Bromobenceno	C ₆ H ₅ Br	0.263	0.2506
27	Bromoetano	C ₂ H ₅ Br	0.32	0.2548
28	Bromometano	CH ₃ Br	0.321	0.1922
29	1,2-butadieno	C ₄ H ₆	0.255	0.1659

Apéndice A.3 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
30	1,3-butadieno	C ₄ H ₆	0.27	0.195
31	Butano	C ₄ H ₁₀	0.274	0.2002
32	1,2-butanodiol	C ₄ H ₁₀ O ₂	0.279	0.6305
33	1,3-butanodiol	C ₄ H ₁₀ O ₂	0.218	0.7043
34	1-butanol	C ₄ H ₁₀ O	0.258	0.5883
35	2-butanol	C ₄ H ₁₀ O	0.254	0.5692
36	1-buteno	C ₄ H ₈	0.278	0.1845
37	cis-2-buteno	C ₄ H ₈	0.272	0.2019
38	trans-2-buteno	C ₄ H ₈	0.274	0.2176
39	Acetato de butilo	C ₆ H ₁₂ O ₂	0.251	0.4394
40	Butilbenceno	C ₁₀ H ₁₄	0.262	0.3941
41	Butil mercaptano	C ₄ H ₁₀ S	0.257	0.2714
42	sec-butil mercaptano	C ₄ H ₁₀ S	0.271	0.2506
43	1-Butyne	C ₄ H ₆	0.262	0.247
44	Butiraldehído	C ₄ H ₈ O	0.25	0.2774
45	Ácido butírico	C ₄ H ₈ O ₂	0.232	0.6805
46	Butironitrilo	C ₄ H ₇ N	0.218	0.3714
47	Dióxido de carbono	CO ₂	0.274	0.2236
48	Disulfuro de carbono	CS ₂	0.275	0.1107
49	Monóxido de carbono	CO	0.299	0.0482
50	Tetracloruro de carbono	CCl ₄	0.272	0.1926
51	Tetrafluoruro de carbono	CF ₄	0.283	0.179
52	Cloro	Cl ₂	0.276	0.0688
53	Clorobenceno	C ₆ H ₅ Cl	0.265	0.2499

Apéndice A.3 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
55	Cloroformo	CHCl ₃	0.293	0.2219
56	Clorometano	CH ₃ Cl	0.276	0.1531
57	1-cloropropano	C ₃ H ₇ Cl	0.27	0.2277
58	2-cloropropano	C ₃ H ₇ Cl	0.276	0.1986
59	m-Cresol	C ₇ H ₈ O	0.242	0.448
60	o-Cresol	C ₇ H ₈ O	0.244	0.4339
61	p-Cresol	C ₇ H ₈ O	0.244	0.5072
62	Cumeno	C ₉ H ₁₂	0.265	0.3274
63	Cianoge	C ₂ N ₂	0.351	0.279
64	Ciclobutano	C ₄ H ₈	0.273	0.184
65	Ciclohexano	C ₆ H ₁₂	0.273	0.2081
66	Ciclohexanol	C ₆ H ₁₂ O	0.254	0.369
67	Ciclohexanona	C ₆ H ₁₀ O	0.229	0.299
68	Ciclohexeno	C ₆ H ₁₀	0.272	0.2123
69	Ciclopentano	C ₅ H ₁₀	0.276	0.1949
70	Ciclopenteno	C ₅ H ₈	0.279	0.1961
71	Ciclopropano	C ₃ H ₆	0.271	0.1278
72	Ciclohexil mercaptano	C ₆ H ₁₂ S	0.255	0.2641
73	Decanal	C ₁₀ H ₂₀ O	0.269	0.582
74	Decano	C ₁₀ H ₂₂	0.254	0.4923
75	Ácido decanoico	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	0.243	0.8126
76	1-Decanol	C ₁₀ H ₂₂ O	0.26	0.607
77	Decil 1-deceno	C ₁₀ H ₂₀	0.253	0.4805
78	mercaptano	C ₁₀ H ₂₂ S	0.23	0.5874

Apéndice A.3 (continúa)

Propiedades físicas de diversas sustancias orgánicas e inorgánicas

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
79	1-Decyne	C ₁₀ H ₁₈	0.254	0.5178
80	Deuterio	D ₂	0.314	-0.1449
81	1,1-dibromoetano	C ₂ H ₄ Br ₂	0.319	0.125
82	1,2-dibromoetano	C ₂ H ₄ Br ₂	0.265	0.2067
83	Dibromometano	CH ₂ Br ₂	0.315	0.2095
84	Éter de dibutilo	C ₈ H ₁₈ O	0.247	0.4476
85	m-diclorobenceno	C ₆ H ₄ Cl ₂	0.251	0.279
86	o-diclorobenceno	C ₆ H ₄ Cl ₂	0.244	0.2192
87	p-diclorobenceno	C ₆ H ₄ Cl ₂	0.251	0.2846
88	1,1-dicloroetano	C ₂ H ₄ Cl ₂	0.28	0.2339
89	1,2-dicloroetano	C ₂ H ₄ Cl ₂	0.253	0.2866
90	Diclorometano	CH ₂ Cl ₂	0.265	0.1986
91	1,1- dicloropropano	C ₃ H ₆ Cl ₂	0.265	0.2529
92	1,2- dicloropropano	C ₃ H ₆ Cl ₂	0.259	0.2564
93	Dietanol amina	C ₄ H ₁₁ NO ₂	0.243	0.9529
94	Dietilamina	C ₄ H ₁₁ N	0.27	0.3039
95	Éter dietílico	C ₄ H ₁₀ O	0.263	0.2811
96	Sulfuro de dietilo	C ₄ H ₁₀ S	0.272	0.29
97	1,1-difluoroetano	C ₂ H ₄ F ₂	0.252	0.2751
98	1,2-difluoroetano	C ₂ H ₄ F ₂	0.229	0.2224
99	Difluorometano	CH ₂ F ₂	0.244	0.2771
100	Diisopropilamina	C ₆ H ₁₅ N	0.308	0.3883
101	Éter diisopropílico	C ₆ H ₁₄ O	0.267	0.3387
102	Diisopropilcetona	C ₇ H ₁₄ O	0.262	0.4044
103	1,1-dimetoxietano	C ₄ H ₁₀ O ₂	0.265	0.3277
104	1,2- dimetoxipropano	C ₅ H ₁₂ O ₂	0.267	0.3522
105	Dimetilacetileno	C ₄ H ₆	0.274	0.2385
106	Dimetilamina	C ₂ H ₇ N	0.264	0.2999
107	2,3-dimetilbutano	C ₆ H ₁₄	0.274	0.2493

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
108	1,1-dimetilciclohexano	C_8H_{16}	0.269	0.2326
119	Tereftalato de dimetilo	$C_{10}H_{10}O_4$	0.229	0.6371
120	1,4-dioxano	$C_4H_8O_2$	0.254	0.2793
121	Éter de difenilo	$C_{12}H_{10}O$	0.243	0.4389
122	Dipropil amina	$C_6H_{15}N$	0.276	0.4497
123	Dodecano	$C_{12}H_{26}$	0.251	0.5764
124	Eicosano	$C_{20}H_{42}$	0.243	0.9069
125	Etano	C_2H_6	0.279	0.0995
126	Etanol	C_2H_6O	0.241	0.6436
127	Acetato de etilo	$C_4H_8O_2$	0.255	0.3664
128	Etil amina	C_2H_7N	0.307	0.2848
129	Etilbencina	C_8H_{10}	0.263	0.3035
130	Benzoato de etilo	$C_9H_{10}O_2$	0.268	0.4771
131	Ácido 2-etilbutanoico	$C_6H_{12}O_2$	0.244	0.6326
132	Butirato de etilo	$C_6H_{12}O_2$	0.25	0.4011
133	Etilciclohexano	C_8H_{16}	0.258	0.2455
134	Etilciclopentano	C_7H_{14}	0.269	0.2701
135	Etileno	C_2H_4	0.281	0.0862
136	Etilendiamina	$C_2H_8N_2$	0.337	0.4724
137	Etilenglicol	$C_2H_6O_2$	0.262	0.5068
138	Etilenimina	C_2H_5N	0.265	0.2007
139	Óxido de etileno	C_2H_4O	0.25876	0.1974
140	Formiato de etilo	$C_3H_6O_2$	0.257	0.2847
141	Ácido 2-etilhexanoico	$C_8H_{16}O_2$	0.262	0.8067

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
143	Éter etilisopropílico	$C_5H_{12}O$	0.276	0.3056
144	Etilisopropilcetona	$C_6H_{12}O$	0.26	0.3891
145	Mercaptano de etilo	C_2H_6S	0.274	0.1878
146	Propionato de etilo	$C_5H_{10}O_2$	0.256	0.3944
147	Éter de etilpropilo	$C_5H_{12}O$	0.275	0.3473
148	Etiltriclorosilano	$C_2H_5Cl_3Si$	0.296	0.2691
149	Flúor	F_2	0.287	0.053
150	Fluorobenceno	C_6H_5F	0.263	0.2472
151	Fluoroetano	C_2H_5F	0.264	0.22
152	Fluorometano	CH_3F	0.252	0.198
153	Formaldehído	CH_2O	0.223	0.2818
154	Formamida	CH_3NO	0.198	0.4124
155	Ácido fórmico	CH_2O_2	0.149	0.3173
156	Furano	C_4H_4O	0.294	0.2015
157	Helio-4	He	0.302	-0.3900
158	Heptadecano	$C_{17}H_{36}$	0.244	0.7697
159	Heptanal	$C_7H_{14}O$	0.267	0.4279
160	Heptano	C_7H_{16}	0.261	0.3495
161	Ácido heptanoico	$C_7H_{14}O_2$	0.252	0.7564
162	1-heptanol	$C_7H_{16}O$	0.261	0.5621
163	2-heptanol	$C_7H_{16}O$	0.265	0.5628

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
164	3-heptanona	C ₇ H ₁₄ O	0.251	0.4076
165	2-heptanona	C ₇ H ₁₄ O	0.251	0.419
166	1-hepteno	C ₇ H ₁₄	0.263	0.3432
167	Heptil mercaptano	C ₇ H ₁₆ S	0.24	0.4226
168	1-Heptina	C ₇ H ₁₂	0.273	0.3778
169	Hexadecano	C ₁₆ H ₃₄	0.243	0.7174
170	Hexanal	C ₆ H ₁₂ O	0.26	0.3872
171	Hexano	C ₆ H ₁₄	0.266	0.3013
172	Ácido hexanoico	C ₆ H ₁₂ O ₂	0.246	0.7299
173	1-hexanol	C ₆ H ₁₄ O	0.259	0.5586
174	2-hexanol	C ₆ H ₁₄ O	0.262	0.5574
175	2-hexanona	C ₆ H ₁₂ O	0.254	0.3846
176	3-hexanona	C ₆ H ₁₂ O	0.259	0.3801
177	1-hexeno	C ₆ H ₁₂	0.267	0.2888
178	3-hexino	C ₆ H ₁₀	0.258	0.2183
179	Hexil mercaptano	C ₆ H ₁₄ S	0.245	0.3681
180	1-hexino	C ₆ H ₁₀	0.272	0.3327
181	2-hexino	C ₆ H ₁₀	0.256	0.2214
182	Hidracina	H ₄ N ₂	0.428	0.3143
183	Hidrógeno	H ₂	0.305	-0.2160
184	Bromuro de hidrógeno	HBr	0.283	0.0734

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
185	Cloruro de hidrogeno	HCl	0.249	0.1315
186	Cianuro de hidrógeno	CHN	0.197	0.4099
187	Fluoruro de hidrógeno	HF	0.117	0.3823
188	Sulfuro de hidrógeno	H ₂ S	0.284	0.0942
189	Ácido isobutírico	C ₄ H ₈ O ₂	0.215	0.6141
190	Amina isopropílica	C ₃ H ₉ N	0.256	0.2759
191	Ácido malónico	C ₃ H ₄ O ₄	0.217	0.9418
192	Ácido metacrílico	C ₄ H ₆ O ₂	0.244	0.3318
193	Metano	CH ₄	0.286	0.0115
194	Metanol	CH ₄ O	0.222	0.5658
195	N-metil acetamida	C ₃ H ₇ NO	0.223	0.4351
196	Acetato de metilo	C ₃ H ₆ O ₂	0.257	0.3313
197	Acetileno metílico	C ₃ H ₄	0.276	0.2115
198	Acrilato de metilo	C ₄ H ₆ O ₂	0.258	0.3423
199	Metilamina	CH ₅ N	0.321	0.2814
200	Benzoato de metilo	C ₈ H ₈ O ₂	0.272	0.4205
201	3-metil-1,2-butadieno	C ₅ H ₈	0.274	0.1874
202	2-metilbutano	C ₅ H ₁₂	0.27	0.2279

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
206	2-metil-2-buteno	C ₅ H ₁₀	0.256	0.287
203	Ácido 2- metilbutanoico	C ₅ H ₁₀ O ₂	0.252	0.5894
204	3-metil-1-butanol	C ₅ H ₁₂ O	0.269	0.5939
205	2-metil-1-buteno	C ₅ H ₁₀	0.26	0.2341
207	2-metil-1-buteno- 3-ino	C ₅ H ₆	0.266	0.137
208	Éter de metilbutilo	C ₅ H ₁₂ O	0.26	0.313
209	Sulfuro de metilbutilo	C ₅ H ₁₂ S	0.253	0.3229
210	3-metil-1-butino	C ₅ H ₈	0.3	0.3081
211	Butirato de metilo	C ₅ H ₁₀ O ₂	0.256	0.3775
212	Metilclorosilano	CH ₃ ClSi	0.279	0.2252
213	Metilciclohexano	C ₇ H ₁₄	0.27	0.2361
214	1- metilciclohexanol	C ₇ H ₁₄ O	0.262	0.2213
215	cis-2- metilciclohexanol	C ₇ H ₁₄ O	0.278	0.6805
216	trans-2- metilciclohexano	C ₇ H ₁₄ O	0.276	0.679
217	Metilciclopentano	C ₆ H ₁₂	0.273	0.2288
218	1- metilciclopenteno	C ₆ H ₁₀	0.278	0.2318

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
219	3-metilciclopenteno	C ₆ H ₁₀	0.286	0.2296
220	Metildiclorosilano	CH ₄ Cl ₂ Si	0.284	0.2758
221	Éter metiletilico	C ₃ H ₈ O	0.267	0.2314
222	Metiletilcetona	C ₄ H ₈ O	0.249	0.3234
223	Sulfuro de metiletilo	C ₃ H ₈ S	0.244	0.2091
224	Formiato de metilo	C ₂ H ₄ O ₂	0.255	0.2556
225	Éter de metilisobutilo	C ₅ H ₁₂ O	0.272	0.3078
226	Metilisobutil cetona	C ₆ H ₁₂ O	0.253	0.3557
227	Isocianato de metilo	C ₂ H ₃ NO	0.273	0.3007
228	Éter de metilisopropilo	C ₄ H ₁₀ O	0.269	0.2656
229	Metilisopropilcetona	C ₅ H ₁₀ O	0.256	0.3208
230	Sulfuro de metilisopropilo	C ₄ H ₁₀ S	0.28718	0.2461
231	Mercaptano de metilo	CH ₄ S	0.268	0.1582
232	Metacrilato de metilo	C ₅ H ₈ O ₂	0.253	0.2802
233	Ácido 2-metiloctanoico	C ₉ H ₁₈ O ₂	0.252	0.7913
234	2-metilpentano	C ₆ H ₁₄	0.27	0.2791

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
235	Éter metílico del pentílico	$C_6H_{14}O$	0.254	0.3442
236	2-metilpropano	C_4H_{10}	0.278	0.1835
237	2-metil-2-propanol	$C_4H_{10}O$	0.26	0.6152
238	2-metilpropeno	C_4H_8	0.275	0.1948
239	Propionato de metilo	$C_4H_8O_2$	0.256	0.3466
240	Éter de metilpropilo	$C_4H_{10}O$	0.265	0.277
241	Sulfuro de metilpropilo	$C_4H_{10}S$	0.259	0.2737
242	Metilsilano	CH_6Si	0.329	0.1314
243	alfa-metilestireno	C_9H_{10}	0.247	0.323
244	Metil terc-butil éter	$C_5H_{12}O$	0.25	0.2466
245	Éter de metilvinilo	C_3H_6O	0.27	0.2416
246	Naftalina	$C_{10}H_8$	0.265	0.302
247	Neón	Ne	0.3	-0.0396
248	Nitroetano	$C_2H_5NO_2$	0.247	0.3803
249	Nitrógeno	N_2	0.289	0.0377
250	Trifluoruro de nitrógeno	F_3N	0.272	0.12

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
251	Nitrometano	CH ₃ NO ₂	0.223	0.348
252	Óxido nitroso	N ₂ O	0.274	0.1409
253	Óxido nítrico	NO	0.251	0.5829
254	Nonadecano	C ₁₉ H ₄₀	0.242	0.8522
255	Nonanal	C ₉ H ₁₈ O	0.263	0.5117
256	Nonano	C ₉ H ₂₀	0.255	0.4435
257	Ácido nonanoico	C ₉ H ₁₈ O ₂	0.248	0.7724
258	1-Nonanol	C ₉ H ₂₀ O	0.261	0.5841
259	2-Nonanol	C ₉ H ₂₀ O	0.271	0.5911
260	1-Nonene	C ₉ H ₁₈	0.258	0.4367
261	Nonil mercaptano	C ₉ H ₂₀ S	0.233	0.526
262	1-Nonyne	C ₉ H ₁₆	0.261	0.471
263	Octadecano	C ₁₈ H ₃₈	0.243	0.8114
264	Octanal	C ₈ H ₁₆ O	0.272	0.4636
265	Octano	C ₈ H ₁₈	0.256	0.3996
266	Ácido octanoico	C ₈ H ₁₆ O ₂	0.252	0.7706
267	1-octanol	C ₈ H ₁₈ O	0.261	0.5697
268	2-octanol	C ₈ H ₁₈ O	0.269	0.5807
269	2-octanona	C ₈ H ₁₆ O	0.249	0.4549
270	3-octanona	C ₈ H ₁₆ O	0.257	0.4406
271	1-octeno	C ₈ H ₁₆	0.262	0.3921
272	Octil mercaptano	C ₈ H ₁₈ S	0.235	0.4497
273	1-Octyne	C ₈ H ₁₄	0.267	0.4233

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
274	Ácido oxálico	$C_2H_2O_4$	0.215	0.9176
275	Oxígeno	O_2	0.288	0.0222
276	Ozono	O_3	0.228	0.2119
277	Pentadecano	$C_{15}H_{32}$	0.244	0.6863
278	Pentanal	$C_5H_{10}O$	0.264	0.3472
279	Pentano	C_5H_{12}	0.27	0.2515
280	Ácido pentanoico	$C_5H_{10}O_2$	0.239	0.7052
281	1-pentanol	$C_5H_{12}O$	0.258	0.5748
282	2-pentanol	$C_5H_{12}O$	0.259	0.5549
283	2-pentanona	$C_5H_{10}O$	0.238	0.3433
284	3-pentanona	$C_5H_{10}O$	0.269	0.3448
285	1-penteno	C_5H_{10}	0.27	0.2372
286	2-pentil mercaptano	$C_5H_{12}S$	0.28	0.2685
287	Pentil mercaptano	$C_5H_{12}S$	0.251	0.3207
288	1-Pentyne	C_5H_8	0.289	0.2899
289	2-pentina	C_5H_8	0.258	0.1752
290	Fenantreno	$C_{14}H_{10}$	0.222	0.4707
291	Fenol	C_6H_6O	0.243	0.4435
292	Isocianato de fenilo	C_7H_5NO	0.277	0.4123
293	Anhídrido ftálico	$C_8H_4O_3$	0.302	0.7025
294	Propadiene	C_3H_4	0.264	0.1041
295	Propano	C_3H_8	0.276	0.1523
296	1-propanol	C_3H_8O	0.254	0.6209
297	2-propanol	C_3H_8O	0.25	0.6544
298	Propenilciclohexeno	C_9H_{14}	0.258	0.342
299	Propionaldehído	C_3H_6O	0.239	0.2559
300	Ácido propiónico	$C_3H_6O_2$	0.22	0.5796
301	Propionitrilo	C_3H_5N	0.204	0.3243
302	Acetato de propilo	$C_5H_{10}O_2$	0.254	0.3889
303	Propilamina	C_3H_9N	0.298	0.2798

Apéndice A.3 (continúa)

Factores de corrección para ecuaciones de estado para gases reales

Componente	Nombre	Fórmula	Zc	Factor acéntrico ω
304	Propilbenceno	C ₉ H ₁₂	0.265	0.3444
305	Propileno	C ₃ H ₆	0.281	0.1376
306	Formato de propilo	C ₄ H ₈ O ₂	0.256	0.3088
307	2-propil mercaptano	C ₃ H ₈ S	0.281	0.2138
308	Propil mercaptano	C ₃ H ₈ S	0.264	0.2318
309	1.2-propilenglicol	C ₃ H ₈ O ₂	0.28	1.1065
310	Quinona	C ₆ H ₄ O ₂	0.305	0.4945
311	Tetrafluoruro de silicio	F ₄ Si	0.349	0.3858
312	Estireno	C ₈ H ₈	0.256	0.2971
313	Ácido succínico	C ₄ H ₆ O ₄	0.223	0.9922
314	Dióxido de azufre	O ₂ S	0.269	0.2454
315	Hexafluoruro de azufre	F ₆ S	0.282	0.2151
316	Trióxido de azufre	O ₃ S	0.255	0.424
317	Ácido tereftálico	C ₈ H ₆ O ₄	0.181	1.0591
318	o-terfenilo	C ₁₈ H ₁₄	0.307	0.5513
319	Tetradecano	C ₁₄ H ₃₀	0.244	0.643
320	Tetrahidrofurano	C ₄ H ₈ O	0.259	0.2254
321	1,2,3,4- tetrahidronaftaleno	C ₁₀ H ₁₂	0.249	0.3353
322	Tetrahidrotiofeno	C ₄ H ₈ S	0.245	0.1996
323	2,2,3,3- tetrametilbutano	C ₈ H ₁₈	0.28	0.245
324	Tiofeno	C ₄ H ₄ S	0.259	0.197
325	Tolueno	C ₇ H ₈	0.264	0.264
326	1,1,2-tricloroetano	C ₂ H ₃ Cl ₃	0.252	0.2591
327	Tridecano	C ₁₃ H ₂₈	0.247	0.6174
328	Trietilamina	C ₆ H ₁₅ N	0.266	0.3162
329	Trimetilamina	C ₃ H ₉ N	0.287	0.2062
330	1,2,3- trimetilbenceno	C ₉ H ₁₂	0.259	0.3666

331	1,2,4- trimetilbenceno	C_9H_{12}	0.258	0.3787
332	2,2,4- trimetilpentano	C_8H_{18}	0.266	0.3035
333	2,3,3- trimetilpentano	C_8H_{18}	0.269	0.2903
334	1,3,5- trinitrobenceno	$C_6H_3N_3O_6$	0.231	0.8623
335	2,4,6- trinitrotolueno	$C_7H_5N_3O_6$	0.253	0.8972
336	Undecano	$C_{11}H_{24}$	0.252	0.5303
337	Acetato de vinilo	$C_{11}H_{24}O$	0.248	0.3513
338	Acetato de vinilo	$C_4H_6O_2$	0.248	0.3513
339	Acetileno de vinilo	C_4H_4	0.264	0.1069
340	Cloruro de vinilo	C_2H_3Cl	0.283	0.1001
341	Triclorosilano de vinilo	$C_2H_3Cl_3Si$	0.276	0.2815
342	Agua	H_2O C	0.229	0.3449
343	m-xileno	C_8H_{10}	0.259	0.3265
344	o-xileno	C_8H_{10}	0.264	0.3101
345	p-xileno	C_8H_{10}	0.259	0.3218

Apéndice A.4

Presión de vapor del agua

		$P^*(mm\ Hg)$ contra $T(^{\circ}C)$										
		<i>Ejemplo:</i> La presión de vapor del agua líquida a 4.3°C es 6.230 mm Hg										
		$T(^{\circ}C)$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
↓ Helio		-14	1.361	1.348	1.336	1.324	1.312	1.300	1.288	1.276	1.264	1.253
		-13	1.490	1.477	1.464	1.450	1.437	1.424	1.411	1.399	1.386	1.373
		-12	1.632	1.617	1.602	1.588	1.574	1.559	1.546	1.532	1.518	1.504
		-11	1.785	1.769	1.753	1.737	1.722	1.707	1.691	1.676	1.661	1.646
		-10	1.950	1.934	1.916	1.899	1.883	1.866	1.849	1.833	1.817	1.800
		-9	2.131	2.122	2.093	2.075	2.057	2.039	2.021	2.003	1.985	1.968
		-8	2.326	2.306	2.285	2.266	2.246	2.226	2.207	2.187	2.168	2.149
		-7	2.537	2.515	2.493	2.472	2.450	2.429	2.408	2.387	2.367	2.346
		-6	2.765	2.742	2.718	2.695	2.672	2.649	2.626	2.603	2.581	2.559
		-5	3.013	2.987	2.962	2.937	2.912	2.887	2.862	2.838	2.813	2.790
		-4	3.280	3.252	3.225	3.198	3.171	3.144	3.117	3.091	3.065	3.039
		-3	3.568	3.539	3.509	3.480	3.451	3.422	3.393	3.364	3.336	3.308
		-2	3.880	3.848	3.816	3.785	3.753	3.722	3.691	3.660	3.630	3.599
	-1	4.217	4.182	4.147	4.113	4.079	4.045	4.012	3.979	3.946	3.913	
	0	4.579	4.542	4.504	4.467	4.431	4.395	4.359	4.323	4.287	4.252	
↓ Agua Líquida		0	4.579	4.613	4.647	4.681	4.715	4.750	4.785	4.820	4.855	4.890
		1	4.926	4.962	4.998	5.034	5.070	5.107	5.144	5.181	5.219	5.256
		2	5.294	5.332	5.370	5.408	5.447	5.486	5.525	5.565	5.605	5.645
		3	5.685	5.725	5.766	5.807	5.848	5.889	5.931	5.973	6.015	6.058
		4	6.101	6.144	6.187	6.230	6.274	6.318	6.363	6.408	6.453	6.498
		5	6.543	6.589	6.635	6.681	6.728	6.775	6.822	6.869	6.917	6.965
		6	7.013	7.062	7.111	7.160	7.209	7.259	7.309	7.360	7.411	7.462
		7	7.513	7.565	7.617	7.669	7.722	7.775	7.828	7.882	7.936	7.990
		8	8.045	8.100	8.155	8.211	8.267	8.323	8.380	8.437	8.494	8.551
		9	8.609	8.668	8.727	8.786	8.845	8.905	8.965	9.025	9.086	9.147

Apéndice A.4 (continúa)

Presión de vapor del agua

<i>P*(mm Hg) contra T(°C)</i>										
<i>Ejemplo: La presión de vapor del agua líquida a 4.3°C es 6.230 mm Hg</i>										
<i>T(°C)</i>	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
10	9.209	9.271	9.333	9.395	9.458	9.521	9.585	9.649	9.714	9.779
11	9.844	9.910	9.976	10.042	10.109	10.176	10.244	10.312	10.380	10.449
12	10.518	10.588	10.658	10.728	10.799	10.870	10.941	11.013	11.085	11.158
13	11.231	11.305	11.379	11.453	11.528	11.604	11.680	11.756	11.833	11.910
14	11.987	12.065	12.144	12.223	12.302	12.382	12.462	12.543	12.624	12.706
15	12.788	12.870	12.953	13.037	13.121	13.205	13.290	13.375	13.461	13.547
16	13.634	13.721	13.809	13.898	13.987	14.076	14.166	14.256	14.347	14.438
17	14.530	14.622	14.715	14.809	14.903	14.997	15.092	15.188	15.284	15.380
18	15.477	15.575	15.673	15.772	15.871	15.971	16.071	16.171	16.272	16.374
19	16.477	16.581	16.685	16.789	16.894	16.999	17.105	17.212	17.319	17.427
20	17.535	17.644	17.753	17.863	17.974	18.085	18.197	18.309	18.422	18.536
21	18.650	18.765	18.880	18.996	19.113	19.231	19.349	19.468	19.587	19.707
22	19.827	19.948	20.070	20.193	20.316	20.440	20.565	20.690	20.815	20.941
23	21.068	21.196	21.324	21.453	21.583	21.714	21.845	21.977	22.110	22.243
24	22.377	22.512	22.648	22.785	22.922	23.060	23.198	23.337	23.476	23.616
25	23.756	23.897	24.039	24.182	24.326	24.471	24.617	24.764	24.912	25.060
26	25.209	25.359	25.509	25.660	25.812	25.964	26.117	26.271	26.426	26.582
27	26.739	26.897	27.055	27.214	27.374	27.535	27.696	27.858	28.021	28.185
28	28.349	28.514	28.680	28.847	29.015	29.184	29.254	29.525	29.697	29.870
29	30.043	30.217	30.392	30.568	30.745	30.923	31.102	31.281	31.461	31.642
30	31.824	32.007	32.191	32.376	32.561	32.747	32.934	33.122	33.312	33.503
31	33.695	33.888	34.082	34.276	34.471	34.667	34.864	35.062	35.261	35.462
32	35.663	35.865	36.068	36.272	36.477	36.683	36.891	37.099	37.308	37.518
33	37.729	37.942	38.155	38.369	38.584	38.801	38.018	39.237	39.457	39.677
34	39.898	40.121	40.344	40.569	40.796	41.023	41.251	41.480	41.710	41.942

Apéndice A.4 (continúa)

Presión de vapor del agua

$P^*(mm\ Hg)$ contra $T(^{\circ}C)$										
<i>Ejemplo:</i> La presión de vapor del agua líquida a 4.3°C es 6.230 mm Hg										
$T(^{\circ}C)$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
35	42.175	42.409	42.644	42.880	43.117	43.355	43.595	43.836	44.078	44.320
36	44.563	44.808	45.054	45.301	45.549	45.799	46.050	46.302	46.556	46.811
37	47.067	47.324	47.582	47.841	48.102	48.364	48.627	48.891	49.157	49.424
38	49.692	49.961	50.231	50.502	50.774	51.048	51.323	51.600	51.879	52.160
39	52.442	52.725	53.009	53.294	53.580	53.867	54.156	54.446	54.737	55.030
40	55.324	55.61	55.91	56.21	56.51	56.81	57.11	57.41	57.72	58.03
41	58.34	58.65	58.96	59.27	59.58	59.90	60.22	60.54	60.86	61.18
42	61.50	61.82	62.14	62.47	62.80	63.13	63.46	63.79	64.12	64.46
43	64.80	65.14	65.48	65.82	66.16	66.51	66.86	67.21	67.56	67.91
44	68.26	68.61	68.97	69.33	69.69	70.05	70.41	70.77	71.14	71.51
45	71.88	72.25	72.62	72.99	73.36	73.74	74.12	74.50	74.88	75.26
46	75.65	76.04	76.43	76.82	77.21	77.60	78.00	78.40	78.80	79.20
47	79.60	80.00	80.41	80.82	81.23	81.64	82.05	82.46	82.87	83.29
48	83.71	84.13	84.56	84.99	85.42	85.85	86.28	86.71	87.14	87.58
49	88.02	88.46	88.90	89.34	89.79	90.24	90.69	91.14	91.59	92.05
$T(^{\circ}C)$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
50	92.51	97.20	102.09	107.20	112.51	118.04	123.80	129.82	136.08	142.60
60	149.38	156.43	163.77	171.38	179.31	187.54	196.09	204.96	214.17	223.73
70	233.7	243.9	254.6	265.7	277.2	289.1	301.4	314.1	327.3	341.0
80	355.1	369.7	384.9	400.6	416.8	433.6	450.9	468.7	487.1	506.1

Apéndice A.4 (continúa)

Presión de vapor del agua

$P^*(mm\ Hg)$ contra $T(^{\circ}C)$										
<i>Ejemplo:</i> La presión de vapor del agua líquida a 4.3°C es 6.230 mm Hg										
$T(^{\circ}C)$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
90	525.76	527.76	529.77	531.78	533.80	535.82	537.86	539.90	541.95	544.00
91	546.05	548.11	550.18	552.26	554.35	556.44	558.53	560.64	562.75	564.87
92	566.99	569.12	571.26	573.40	575.55	577.71	579.87	582.04	584.22	586.41
93	588.60	590.80	593.00	595.21	597.43	599.66	601.89	604.13	606.38	608.64
94	610.90	613.17	615.44	617.72	620.01	622.31	624.61	626.92	629.24	631.57
95	633.90	636.24	638.59	640.94	643.30	645.67	648.05	650.43	652.82	655.22
96	657.62	660.03	662.45	664.88	667.31	669.75	672.20	674.66	677.12	679.69
97	682.07	684.55	687.04	689.54	692.05	694.57	697.10	699.63	702.17	704.71
98	707.27	709.83	712.40	714.98	717.56	720.15	722.75	725.36	727.98	730.61
99	733.24	735.88	738.53	741.18	743.85	746.52	749.20	751.89	754.58	757.29
100	760.00	762.72	765.45	768.19	770.93	773.68	776.44	779.22	782.00	784.78
101	787.57	790.37	793.18	796.00	798.82	801.66	804.50	807.35	810.21	813.08

Apéndice A.5

Constantes de Antoine

$$\log_{10}P^* = A - \frac{B}{T + C} \quad T \text{ en } ^\circ\text{C}$$

Ejemplo: la presión de vapor del acetaldehído a 25°C se determina así

$$\log_{10}P^*_{\text{C}_2\text{H}_4\text{O}} = 8.00552 - \frac{1600.017}{25 + 291.809}$$

$$P^*_{\text{C}_2\text{H}_4\text{O}} \text{ a } 25^\circ\text{C} = 902 \text{ mm Hg}$$

Compuesto	Fórmula	Rango (°C)	A	B	C
Acetaldehído	C ₂ H ₄ O	-0.2 a 34.4	8,00552	1600,017	291,809
Acetato de etilo	C ₄ H ₈ O ₂	15.6 a 75.8	7,10179	1244,951	217.88
Acetato de etilo*	C ₄ H ₈ O ₂	-20 a 1 50	7,09808	1238,71	217
Acetato de metilo	C ₃ H ₆ O ₂	1.8 a 55.8	7,06524	1157,63	219,726
Acetato de vinilo	C ₄ H ₆ O ₂	21.8 a 72.0	7,2101	1296,13	226,655
Acetona	C ₃ H ₆ O	-12.9 a 55.3	7,11714	1210,595	229,664
Ácido acético	C ₂ H ₄ O ₂	29.8 a 126.5	7,38782	1533,313	222,309
Ácido acético*	C ₂ H ₄ O ₂	0 a 36	7,18807	1416,7	225
Ácido acrílico	C ₃ H ₄ O ₂	20.0 a 70.0	5,65204	648,629	154,683
Ácido butírico	C ₄ H ₈ O ₂	20.0 a 150.0	8,71019	2433,014	255,189
Ácido fórmico	CH ₂ O ₂	37.4 a 100.7	7,58178	1699,173	260,714
Ácido propiónico	C ₃ H ₆ O ₂	72.4 a 128.3	7,71423	1733,418	217,724
Agua*	H ₂ O	0 a 60	8,10765	1750,286	235
Agua*	H ₂ O	60 a 150	7,96681	1668,21	228
Amoniaco*	NH ₃	-83 a 60	7,55466	1002,711	247,885
Anhídrido acético	C ₄ H ₆ O ₃	62.8 a 139.4	7,14948	1444,718	199,817
Anilina	C ₆ H ₇ N	102.6 a 185.2	7,3201	1731,515	206,049
Benceno	C ₆ H ₆	14.5 a 80.9	6,89272	1203,531	219,888
Bromuro de metilo	CH ₃ BR	-70.0 a 3.6	7,09084	1046,066	244,914
/-Butano	I-C ₄ H ₁₀	-85.1 a -11.6	6,78866	899,617	241,942
//-Butano	N-C ₄ H ₁₀	-78.0 a -0.3	6,82485	943,453	239,711
1-Butanol	C ₄ H ₁₀ O	89.2 a 125.7	7,36366	1305,198	173,427
2-Butanol	C ₄ H ₁₀ O	72.4 a 107.1	7,20131	1157	168,279
1-Buteno	C ₄ H ₈	-77.5 a -3.7	6,53101	810,261	228,066
Cianuro de hidrógeno	H ₂ CN	-16.4 a 46.2	7,52823	1329,49	260,418
Ciclohexano	C ₆ H ₁₂	19.9 a 81.6	6,84941	1206,001	223.148
Ciclohexanol	C ₆ H ₁₂ O	93.7 a 160.7	6,2553	912,866	109,126
Clorobenceno	C ₆ H ₅ Cl	62.0 a 131.7	6,97808	1431,053	217,55
Clorobenceno*	C ₆ H ₅ Cl	0 a 42	7,1069	1500	224

Apéndice A.5 (continúa)

Constantes de Antoine

Compuesto	Fórmula	Rango (°C)	A	B	C
Clorobenceno*	C_6H_5Cl	42 a 230	6,94504	1413,12	216
Cloroformo	$CHCl_3$	-10.4 a 60.3	6,95465	1170,966	226,232
Cloroformo*	$CHCl_3$	-30 a 150	6,90328	1163,03	227,4
Cloruro de etilo	C_2H_5Cl	-55.9 a 12.5	6,98647	1030,007	238,612
Cloruro de metilo	CH_3Cl	-75.0 a 5.0	7,09349	948,582	249,336
//-Decano	$N-C_{10}H_{22}$	94.5 a 175.1	6,95707	1503,568	194,738
1-Deceno	$C_{10}H_{20}$	86.8 a 171.6	6,95433	1497,527	197,056
1,1-Dicloroetano	$C_2H_4Cl_2$	-38.8 a 17.6	6,97702	1174,022	229,06
1,2-Dicloroetano	C_2H_4Cl	-30.8 a 99.4	7,0253	1271,254	222,927
Diclorometano	CH_2Cl_2	-40.0 a 40	7,40916	1325,938	252,616
Dietilcetona	$C_5H_{10}O$	56.5 a 111.3	7,02529	1310,281	214,192
Dietilenglicol	$C_4H_{10}O_2$	130.0 a 243.0	7,63666	1939,359	162,714
Dimetilamina	C_7H_7N	-71.8 a 6.9	7,08212	960,242	221,667
AW-Dimetilformami	C_3H_7NO	30.0 a 90	6,92796	1400,869	196,434
1,4-Dioxano	$C_4H_8O_2$	20.0 a 105.0	7,43155	1554,679	240,337
Disulfuro de carbono	CS_2	3.6 a 79.9	6,94279	1169,11	241,593
Estireno	C_8H_8	29.9 a 144.8	7,06623	1507,434	214,985
Etanol	C_2H_6O	19.6 a 93.4	8,1122	1592,864	226,184
Etanolamina	C_2H_7NO	65.4 a 170.9	7,4568	1577,67	173,368
Éter dietílico	$C_4H_{10}O$	-60.8 a 19.9	6,92032	1064,066	228,799
Éter dimetílico	C_2H_6O	-782 a -24.9	6,97603	889,264	241,957
Etilbenceno	C_8H_{10}	56.5 a 137.1	6,9565	1423,543	213,091
1,2-Etilencliamina	C_2H_8N	26.5 a 117.4	7,16871	1336,235	194,366
Etilenglicol	$C_2H_6O_2$	50.0 a 200.0	8,09083	2088,936	203,454
Fenol	C_6H_6O	107.2 a 181.8	7,13301	1516,79	174,954
Formaldehido	$HCHO$	-109.4 a -22.3	7,19578	970,595	244,124
Glicerol	$C_3H_8O_3$	183.3 a 260.4	6,16501	1036,056	28,097
i-Heptano	$I-C_7H_{16}$	18.5 a 90.9	6,87689	1238,122	220
n-Heptano	$N-C_7H_{16}$	25.9 a 99.3	6,90253	1267,828	217
1-Hepteno	C_7H_{14}	21.6 a 94.5	6,91381	1265,12	220
i-Hexano	$I-C_6H_{14}$	12.8 a 61.1	6,86839	1151,401	228
n-Hexano	$N-C_6H_{14}$	13.0 a 69.5	6,88555	1175,817	225
n -Hexeno	C_6H_{12}	15.9 a 64.3	6,8688	1.154,65	226
Metacrilato de metil	$C_5H_8O_2$	39.2 a 89.2	8,40919	2050,467	274

Apéndice A.5 (continúa)

Constantes de Antoine

Compuesto	Fórmula	Rango (°C)	A	B	C
Metanol	CH ₃ OH	14.9 a 83.7	8,08097	1582,271	240
Metanol*	CH ₃ OH	-20 a 140	7,87863	1473,11	230
Metilamina	CH ₅ N	-83.1 a -6.2	7,3369	1011,532	233,286
Metilciclohexano	C ₇ H ₁₄	25.6 a 101.8	6,82827	1273,673	221,723
Metiletilcetona	C ₄ H ₈ O	42.8 a 88.4	7,06356	1261,339	221,969
Metilisobutilcetona	C ₆ H ₁₂ O	21.7 a 116.2	6,67272	1168,408	191,944
Naftaleno	C ₁₀ H ₈	80.3 a 179.5	7,03358	1756,328	204,842
Nitrobenceno	C ₆ H ₅ NO ₂	134.1 a 210.6	7,11562	1746,586	201,783
Nitrometano	CH ₃ NO ₂	55.7 a 136.4	7,28166	1446,937	227,6
n-Nonano	N-C ₉ H ₂₀	70.3 a 151.8	6,93764	1430,459	201,808
1-Noneno	C ₉ H ₁₈	66.6 a 147.9	6,95777	1437,862	205,814
i-Octano	I-C ₈ H ₁₈	41.7 a 118.5	6,88814	1319,529	211,625
n-Octano	N-C ₈ H ₁₈	52.9 a 126.6	6,91874	1351,756	209,1
1 -Octeno	C ₈ H ₁₆	44.9 a 122.2	6,93637	1355,779	213,022
Oxido de etileno	C ₂ H ₄ O	0.3 a 31.8	8,69016	2005,779	334,765
Oxido de propileno	C ₃ H ₆ O	-24.2 a 34.8	7,01443	1086,369	228,594
i-Pentano	I-C ₅ H ₁₂	16.3 a 28.6	6,73457	992,019	229,564
n-Pentano	N-C ₅ H ₁₂	13.3 a 36.8	6,84471	1060,793	231,541
1-Pentanol	C ₅ H ₁₂ O	74.7 a 156.0	7,18246	1287,625	161,33
1 -Penteno	C ₅ H ₁₀	12.8 a 30.7	6,84268	1043,206	233,344
Piridina	C ₅ H ₅ N	67.3 a 152.9	7,04115	1373,799	214,979
1-Propanol	C ₃ H ₈ O	60.2 a 104.6	7,74416	1437,686	198,463
2-Propanol	C ₃ H ₈ O	52.3 a 89.3	7,74021	1359,517	197,527
Tetracloruro de carb	CCL ₄	14.1 a 76.0	6,87926	1212,021	226,409
Tolueno	C ₇ H ₈	35.3 a 111.5	6,95805	1346,773	219,693
1,1,1-Tricloroetano	C ₂ H ₃ Cl ₃	-5.4 a 16.9	8,64344	2136,621	302,769
1,1,2-Tricloroetano	C ₂ H ₃ Cl ₃	50.0 a 113.7	6,95185	1314,41	209,197
Tricloroetileno	C ₂ HCl ₃	17.8 a 86.5	6,51827	1018,603	192,731
m-Xileno	m-C ₈ H ₁₀	59.2 a 140.0	7,00646	1460,183	214,827
o-Xileno	o-C ₈ H ₁₀	63.5 a 145.4	7,00154	1476,393	213,872
p-Xileno	p-C ₈ H ₁₀	58.3 a 139.3	6,9882	1451,792	215,111

Apéndice A.7

Constante de la ley de Henry

Componente	CAS no	Fórmula	H, atm	Rango
Hidrocarburos parafínicos				
Metano	74828	CH ₄	36600	4
Etano	74840	C ₂ H ₆	26700	3
Propano	74986	C ₃ H ₈	37800	3
Butano	106978	C ₄ H ₁₀	51100	3
Pentano	109660	C ₅ H ₁₂	70000	3
Octano	111659	C ₈ H ₁₈	274000	3
Nonano	111842	C ₉ H ₂₀	329000	3
Oleofinas				
Etileno	74851	C ₂ H ₄	11700	3
Propileno	115071	C ₃ H ₆	11700	4
Aromáticos				
Benceno	71432	C ₆ H ₆	299	10
Tolueno	108883	C ₇ H ₈	354	10
o-xileno	95476	C ₈ H ₁₀	272	10
Cumeno	98828	C ₉ H ₁₂	724	9
Fenol	108952	C ₆ H ₆ O	0,0394	7
Aldehidos				
Acetaldehído	75070	C ₂ H ₄ O	5,56	3
Propanal	123386	C ₃ H ₆ O	4,36	4
Cetonas				
Metiletilcetona	78933	C ₄ H ₈ O	2,59	5
Esteres				
Formiato de me	107313	C ₂ H ₄ O ₂	13,6	3
Formiato de etil	109944	C ₃ H ₆ O ₂	13,6	3
Acetato de meti	79209	C ₃ H ₆ O ₂	5,04	3
Acetato de buti	123864	C ₆ H ₁₂ O ₂	13,6	3
Contienen Cloro				
Cloruro de meti	74873	CH ₃ Cl	556	?
Cloroetano	75003	C ₂ H ₅ Cl	681	10
Clorobenceno	108907	C ₆ H ₅ Cl	204	10
Alcoholes				
Metanol	67561	CH ₄ O	0,272	4
Etanol	64175	C ₂ H ₆ O	0,272	4

Apéndice A.7

Constante de la ley de Henry

Componente	CAS no	Fórmula	H, atm	Rango
1-propanol	71238	C ₃ H ₈ O	0,507	3
1-butanol	71363	C ₄ H ₁₀ O	0,482	3
Varios				
Acrilonitrilo	107131	C ₃ H ₃ N	5,54	3
Sulfuro de dime	75183	C ₂ H ₆ S	121	3
Disulfuro de din	624920	C ₂ H ₆ S ₂	68,1	3
Mercaptano de	74931	CH ₄ S	177	3
Mercaptano de	75081	C ₂ H ₆ S	161	3
Piridina	110861	C ₅ H ₅ N	0,817	3

Apéndice A.7

Constante de la ley de Henry

Componente	CAS no.	Formula	$H = y^{\infty}P_{vp}$
Pentano	109660	C ₅ H ₁₂	63700
Hexano	1100543	C ₆ H ₁₄	84600
Heptano	142825	C ₇ H ₁₆	120000
Benceno	71432	C ₆ H ₆	309
Tolueno	108883	C ₇ H ₈	344
o-xileno	95476	C ₈ H ₁₀	267
Cumeno	98,828	C ₉ H ₁₂	613
Estireno	100425	C ₈ H ₈	145
Formaldehído	50000	CH ₂ O	14,3
Acetaldehído	75070	C ₂ H ₄ O	4,54
Propanal	123386	C ₃ H ₆ O	5,45
Acetona	67641	C ₃ H ₆ O	2,13
Metiletilcetona	78933	C ₄ H ₈ O	3,11
Metil n-propil c	107879	C ₅ H ₁₀ O	4,6
Ácido fórmico	64186	CH ₂ O ₂	0,0404
Acetato de meti	79209	C ₃ H ₆ O ₂	6,38
Acetato de etilo	141786	C ₄ H ₈ O ₂	8,01
Acetato de buti	123864	C ₆ H ₁₂ O ₂	12,3
Cloroetano	75003	C ₂ H ₅ Cl	626
1-cloropropano	74986	C ₃ H ₇ Cl	792
Clorobenceno	108907	C ₆ H ₅ Cl	219
Metanol	67561	CH ₄ O	0,263
Etanol	64175	C ₂ H ₆ O	0,293
Piridina	110861	C ₅ H ₅ N	0,544
Éter dietílico	60297	C ₄ H ₁₀ O	48,7
Tiofeno	110021	C ₄ H ₄ S	160

Apéndice A.7

Constantes de solubilidad y constante de la ley de Henry

Nombre	Fórmula	A	B	C	D	Rango T (K)	H a 25 °C
Acetileno	C ₂ H ₂	-156.51	8160,2	21,403	0	274-343	1330
Dióxido de carbono	CO ₂	-159.854	8741,68	21,6694	-1,10E-03	273-353	1635
Monóxido de carbono	CO	-171.764	8296,9	23,3376	0	273-353	58000
Etano	C ₂ H ₆	-250.812	12695,6	34,7413	0	275-323	29400
Etileno	C ₂ H ₄	-153.027	7965,2	20,5248	0	287-346	11726
Helio	He	-105.9768	4259,62	14,0094	0	273-348	142900
Hidrógeno	H ₂	-125.939	5528,45	16,8893	0	273-345	70800
Metano	CH ₄	-338.217	13282,1	51,9144	-0.0425831	273-523	39200
Nitrógeno	N ₂	-181.587	8632,13	24,7981	0	273-350	84600
Oxígeno	O ₂	-171.2542	8391,24	23,24323	0	273-333	43400