



RESOLUCIÓN DE BALANCE DE MATERIA CON REACCIONES QUÍMICAS

Apellidos, nombre	Fombuena Borràs, Vicent (vifombor@upv.es) Cardona Navarrete, Salvador C. (scardona@iqn.upv.es) Domínguez Candela, Iván (ivdocan@doctor.upv.es)
Departamento	Departamento de Ingeniería Química y Nuclear (DIQN)
Centro	Escuela Politécnica Superior de Alcoy (EPSA) Universitat Politècnica de València (UPV)

1 Resumen de las ideas clave

Los procesos químicos presentan una gran importancia a nivel industrial, siendo el objetivo conseguir productos con valor añadido a partir de materias primas. En la obtención de estos productos, las reacciones químicas presentan un papel crucial porque son las que rigen que productos se generan. Cualquier proceso químico podría resumirse en tres etapas básicas: una primera etapa inicial de carácter físico, la propia reacción química y una última etapa física donde se obtiene el producto final.

El seguimiento de estos procesos químicos se puede realizar mediante el uso de balances de materia con reacciones químicas. Es necesario conocer con exactitud la reacción química que está produciéndose en el proceso, ya que esto determinará la cantidad de productos obtenidos. La reacción también nos permite conocer que proporción de cada reactivo es necesario para la obtención de productos finales, pudiéndose producir, en muchos casos, subproductos no deseados.

Los balances de materia con presencia de reacciones químicas dentro de los volúmenes de control a evaluar, adquieren por tanto de una mayor dificultad de resolución por parte del alumno. Aquí es donde se crea la necesidad de obtener una metodología clara para la resolución de estos balances de materia donde los diferentes componentes se consumen y se generan. En el presente artículo docente, se detallará una metodología clara y concisa para la resolución de balances de materia con reacción química, la cual se puede aplicar de forma genérica a cualquier proceso químico. Para ello, se realiza un ejemplo explicando paso a paso su resolución, respondiendo preguntas que el alumno podría plantearse durante la resolución.

2 Introducción

La ingeniería química es una rama de la ingeniería que está estrictamente relacionada con la aplicación de procesos químicos a nivel industrial. Estos procesos tienen el objetivo de obtener un producto con valor añadido a partir de materias primas, mediante reacciones químicas conocidas y procesos de transformación físico. En general, los procesos presentan tres etapas bien diferenciadas:

- La etapa inicial tiene como objetivo el acondicionamiento de la materia prima que se introduce en el proceso industrial. Esta es una etapa física debido a que se produce un cambio físico de la materia prima a introducir.
- La etapa intermedia es donde ocurre la reacción química, es decir, un cambio fisicoquímico, químico, bioquímico o biológico de los reactivos para transformarlos en productos.
- La última etapa se basa en la separación y/o concentración de los productos obtenidos. Se debe tener en cuenta que, en una reacción química, además de la generación de productos deseables, también hay otros subproductos que pueden no ser de interés. Estos subproductos, deben ser separados por etapas físicas para obtener los productos de interés.

Se puede observar en la Figura 1, un esquema de las etapas generales que suele tener un proceso químico [1].

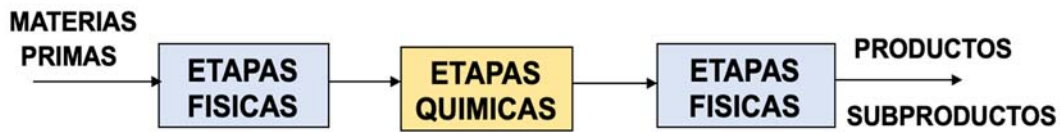


Figura 1. Etapas generales del proceso químico

La reacción química presenta un papel muy importante a nivel industrial para la obtención de productos determinados. Es necesario por ello, conocer que ocurre en la reacción y además saber que cantidad de reactivos son necesarios para la obtención de los productos en las cantidades necesarias. La estequiometría es muy importante, ya que nos indica la proporción necesaria para que una determinada reacción se pueda llevar a cabo, estableciendo además cual es el reactivo limitante [2].

Los procesos químicos también se rigen por la ley de la conservación de la masa, donde además de entrar reactivos y salir productos en un determinado proceso, también ocurre algo internamente (reacción química) que a priori se debe conocer con mucha exactitud. Se produce una generación de nuevos productos y esto se debe contabilizar en los balances de materia. El uso de estos balances permite conocer que cantidad de reactivos se han consumido para generar los productos. El inconveniente es que, en muchos procesos industriales, lo más habitual es que más de una reacción química intervenga. En la mayoría de los casos aparecen reacciones múltiples donde puede que un producto generado por una reacción sea consumido por la siguiente, y así sucesivamente.

En la resolución de estos balances de materia con reacciones químicas, es necesario establecer una metodología clara para su correcta resolución. Es tal la necesidad que cuando intervienen varias reacciones químicas en el proceso, el alumno no comprende si un determinado producto desaparece o se genera con una determinada velocidad de reacción. Por ello, se sigue una metodología en el desarrollo de los balances de materia con reacciones químicas, los cuales son los más habituales en la industria. Por tanto, haciendo uso de esta metodología, el alumno podrá entender de forma más clara como intervienen determinados componentes en las reacciones.

3 Objetivos

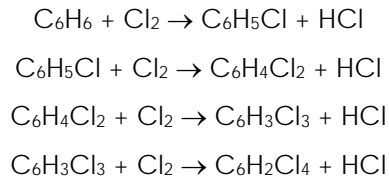
Una vez realizada la lectura del artículo, el alumno será capaz de:

- Aplicar una metodología detallada sobre la obtención de las velocidades de reacción por componente cuando interviene una reacción química.
- Aplicar la metodología de los grados de libertad (GDL) para la resolución de los balances de materia.
- Interpretar los resultados obtenidos aplicando los balances de materia.

4 Desarrollo

A continuación, se mostrará el enunciado del problema a resolver, donde se aplican los balances de materias con reacciones químicas para la resolución de las variables.

Se parte de un proceso industrial donde la cloración del benceno produce una mezcla de productos mono, di-, tri- y tetra sustituidos, mediante la siguiente cadena de reacciones:



El producto deseado es el triclorobenceno, mientras que los otros productos son secundarios. Además, la composición de los productos en base libre de HCl y Cl₂ es la siguiente:

C ₆ H ₆	1 %
C ₆ H ₅ Cl	7 %
C ₆ H ₄ Cl ₂	12 %
C ₆ H ₃ Cl ₃	75 %
C ₆ H ₂ Cl ₄	5 %

En el reactor entran dos corrientes diferentes de producto. Una corriente es de benceno (C₆H₆) y la otra de cloro (Cl₂), presentando una relación de flujos 1/3.6 respectivamente. Por otra parte, todos los productos salen por la misma corriente. Si la entrada del reactor es de 1000 mol/h de benceno, se pide determinar los flujos y composiciones molares de todas las corrientes así como la conversión de benceno en el reactor.

Antes de comenzar cualquier ejercicio de balances de materia, se debe dibujar el diagrama de flujo con sus respectivas corrientes, como se observa en la Figura 2. De esta forma, se podrá colocar correctamente las variables de cada corriente y los flujos.

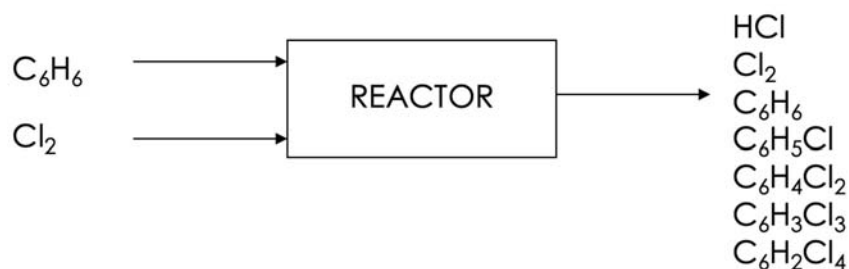


Figura 2. Diagrama de flujo del proceso

Después de realizar el diagrama, se debe identificar el volumen de control, enumerar las corrientes y etiquetar las variables.

- Volumen de control: En este proceso, el volumen de control (VC) es sencillo de identificar. El único elemento que presenta divergencias y convergencias de corrientes es el propio reactor, por lo que será nuestro VC.

- Numeración de corrientes: Por otro lugar, se observan tres corrientes involucradas en el proceso. Dos de ellas son de entrada al reactor donde cada una tiene solo un componente y la otra corriente es de salida donde intervienen todos los componentes. Por tanto, hay 3 corrientes en el proceso y cuyos flujos se etiquetará con la letra "F" seguido del subíndice de la corriente.
- Etiquetar variables: se realiza para evitar tener nombres largos y facilitar el manejo de estas. Las composiciones vendrán dadas con la letra "X" seguida del subíndice de cada elemento involucrado en cada corriente. Cada componente se identificará con una letra, obteniéndose así una tabla de abreviaciones. En este caso, los diferentes productos del benceno clorado se identifican con las letras M, D, T y F en función de los cloros presentes en el benceno, siendo M el monoclorobenceno, D el diclorobenceno, T el triclorobenceno y F el tetraclobenceno.

En primer lugar... ¿Qué ocurre con las composiciones de las corrientes 1 y 2?

En este caso, como en cada una de estas corrientes únicamente se encuentra un componente (Benceno para la corriente 1 y Cloro para la 2), las composiciones molares de estos componentes en cada una de las corrientes es igual a 1 y, por tanto, quedaría como $X_{B1}=1$ y $X_{C2}=1$

Una vez identificado todo lo anterior, se traslada en el diagrama de flujo como se observa en la Figura 3.

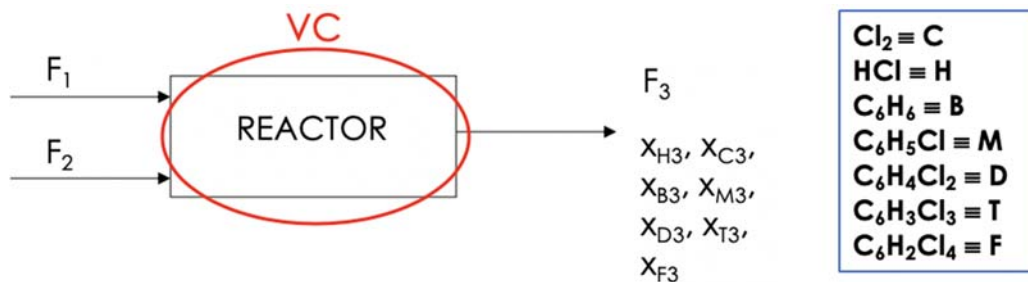


Figura 3. Numeración e identificación de variables

Con todo más esquemático y claro, se procede a realizar el análisis de grados de libertad (GDL) para el volumen de control. Cabe destacar que en el caso de que hubieran mas VC habría que realizar este análisis para cada uno de ellos.

Obtención de las ecuaciones de balance de materia independientes

Los balances de materia para este volumen de control se rigen por el principio de la conservación de la masa.

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

Si no se dice lo contrario, este proceso es un sistema en estado estacionario por lo que no aparece acumulación. Por otra parte, si que hay una generación de productos debido a la presencia de reacciones químicas. Por tanto, el balance de materia quedaría:

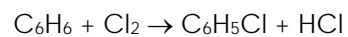
$$[\text{Salida}] = [\text{Entrada}] + [\text{Generación}]$$

¿Cómo se introducen las reacciones químicas en un balance de materia?

Las reacciones químicas dependen directamente de una variable crítica, la cual es la velocidad de reacción (R). En cada reacción aparecerá siempre una velocidad de reacción que estará relacionada con los componentes que se consumen y los que se generan. Los componentes que se consuman en la reacción presentarán el signo "-" y los que se generen el signo "+". Cabe destacar que habrá tantas velocidades de reacción como reacciones en el sistema. Por ello, a continuación, se mostrará el desarrollo de como relacionar las velocidades de reacción con los componentes que intervienen.

Comencemos con la primera reacción, cuya velocidad de reacción se denominará R_1 . La relación entre R_1 y los componentes se obtiene mediante un cociente de la velocidad de reacción de cada componente respecto a su coeficiente estequiométrico, siendo en todas las reacciones los coeficientes igual a 1. Como se observa en la primera reacción, tanto el benceno como el cloro desaparecen y como consecuencia se introduce un signo "-" en su coeficiente estequiométrico. De forma contraria ocurre con los productos generados, que se introduce un signo positivo. Las abreviaciones de la velocidad de reacción de cada componente vendrán dadas por la letra "R" seguida del subíndice del componente y el número de la reacción en la que interviene.

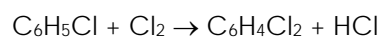
Reacción 1



$$R_1 = \frac{R_{B1}}{-1} = \frac{R_{C1}}{-1} = \frac{R_{M1}}{+1} = \frac{R_{H1}}{+1}$$

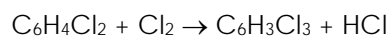
Esto se realizará de la misma manera para cada reacción, pero se debe tener en cuenta que, al aparecer múltiples reacciones, los productos generados por una reacción pueden ser consumidos por la siguiente. Esto es lo que ocurre con las múltiples cloraciones del benceno, donde el producto generado en la reacción anterior será consumido por la siguiente para dar un nuevo producto. Por tanto, las siguientes relaciones son:

Reacción 2



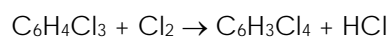
$$R_2 = \frac{R_{M2}}{-1} = \frac{R_{C2}}{-1} = \frac{R_{D2}}{+1} = \frac{R_{H2}}{+1}$$

Reacción 3



$$R_3 = \frac{R_{D3}}{-1} = \frac{R_{C3}}{-1} = \frac{R_{T3}}{+1} = \frac{R_{H3}}{+1}$$

Reacción 4



$$R_4 = \frac{R_{T4}}{-1} = \frac{R_{C4}}{-1} = \frac{R_{F4}}{+1} = \frac{R_{H4}}{+1}$$

Una vez obtenido las relaciones entre la velocidad de reacción y los componentes intervinientes, se procede a obtener los balances de materia para cada componente. Se recuerda que F_1 y F_2 se multiplicarían por X_{B1} y X_{C2} respectivamente, pero al ser de valor 1 se omite su introducción.

Se comenzará con el balance de materia del benceno (B), correspondiente a la corriente 1 (F_1). En este caso, el benceno entra al VC y sale en la corriente 3 con una

determinada composición (X_{B3}). Además, como interviene en la reacción química, aparecerá sumando la velocidad de reacción de ese componente.

¿Por qué se suma y no se resta la velocidad de reacción del componente?

Se suma únicamente para indicar que interviene una velocidad de reacción en el balance de materia de ese componente. Posteriormente, cuando se obtenga la velocidad de reacción del componente en función de la reacción 1 (R_1), ya nos indicará cual es el signo real dependiendo de si se genera o si se consume.

A continuación, se muestra como quedaría el balance de materia del Benceno (B)

$$B \rightarrow F_1 - F_3 \cdot X_{B3} + R_{B1} = 0$$

Pero como se debe obtener R_{B1} en función de la velocidad de reacción 1 (R_1), se debe despejar de la siguiente forma:

$$R_1 = \frac{R_{B1}}{-1} \rightarrow R_{B1} = -1 \cdot R_1$$

Por tanto, sustituyendo R_{B1} en el balance de materia del benceno quedaría:

$$B \rightarrow F_1 - F_3 \cdot X_{B3} - R_1 = 0$$

¿Qué ocurre entonces cuando un componente interviene en más de una reacción?

La forma de resolución es la misma, se deben de seguir los mismos pasos que los explicados anteriormente. En este caso, se debe introducir tantas velocidades de reacción como en reacciones intervenga el componente. De forma más clara se observará en la obtención de los balances de materia de los componentes restantes.

En la Tabla 1 se resumen los balances de materias con reacción química para cada componente, donde se detalla claramente las velocidades de reacción en las que interviene. Se recalca que en la columna donde pone $R_{comp}=F(R)$, la relación se ha obtenido a partir de las relaciones expuesta en la página 5.

Componentes	Balances de materia	$R_{comp}=F(R)$	Identificación
C ₆ H ₆ (B)	$F_1 - F_3 \cdot X_{B3} + R_{B1} = 0;$	$R_{B1} = -1 \cdot R_1$	$F_1 - F_3 \cdot X_{B3} - R_1 = 0$
HCl (H)	$-F_3 \cdot X_{H3} + R_{H1} + R_{H2} + R_{H3} + R_{H4} = 0$	$R_{H1} = +1 \cdot R_1$ $R_{H2} = +1 \cdot R_2$ $R_{H3} = +1 \cdot R_3$ $R_{H4} = +1 \cdot R_4$	$F_3 \cdot X_{H3} + R_1 + R_2 + R_3 + R_4 = 0;$
Cl ₂ (C)	$F_2 - F_3 \cdot X_{C3} + R_{C1} + R_{C2} + R_{C3} + R_{C4} = 0$	$R_{C1} = -1 \cdot R_1$ $R_{C2} = -1 \cdot R_2$ $R_{C3} = -1 \cdot R_3$ $R_{C4} = -1 \cdot R_4$	$F_2 - F_3 \cdot X_{C3} - R_1 - R_2 - R_3 - R_4 = 0$
C ₆ H ₅ Cl (M)	$-F_3 \cdot X_{M3} + R_{M1} + R_{M2} = 0$	$R_{M1} = +1 \cdot R_1$ $R_{M2} = -1 \cdot R_2$	$-F_3 \cdot X_{M3} + R_1 - R_2 = 0$



$C_6H_4Cl_2$ (D)	$-F_3 \cdot X_{D3} + R_{D2} + R_{D3} = 0$	$R_{D2} = +1 \cdot R_2$ $R_{D3} = -1 \cdot R_3$	$-F_3 \cdot X_{D3} + R_2 - R_3 = 0$
$C_6H_3Cl_3$ (T)	$-F_3 \cdot X_{T3} + R_{T3} + R_{T4} = 0$	$R_{T3} = +1 \cdot R_3$ $R_{T4} = -1 \cdot R_4$	$-F_3 \cdot X_{T3} + R_3 - R_4 = 0$
$C_6H_2Cl_4$ (F)	$-F_3 \cdot X_{F3} + R_{F4} = 0$	$R_{D4} = +1 \cdot R_4$	$-F_3 \cdot X_{F3} + R_4 = 0$

Tabla 1. Resumen ecuaciones de balance de materia independientes

Una vez ya realizados los balances de materia por componentes, donde existen **7 BM**, es necesario conocer si existe alguna variable especificada por el problema y las relaciones adicionales.

Variable especificada por el problema

En este apartado se debe tener cuidado a la hora de seleccionar que variables son especificadas. Hay una variable clara, y es la del flujo molar de la corriente 1, correspondiente a la de Benceno (B). Por tanto, podemos tomar esta como futura base de cálculo.

El enunciado también nos da la composición de los productos obtenidos, pero en base libre de HCl y Cl₂. Esto significa que la composición, por ejemplo de C₆H₅Cl (M) la cual es el 7%, es respecto a todos los componentes benceno clorados y benceno, sin tener en cuenta HCl y Cl₂ los cuales también salen en F₃. La composición del componente M en la corriente 3, realmente no es 7%, si no que es menor su composición debido a que hay presencia de HCl y Cl₂. Por tanto, esto no se considera una variable específica, y habrá que obtener relaciones adicionales.

Por tanto, habrá 1 variable especificada que será la Base de Cálculo para F1, en este caso 1000 moles/h.

Relaciones adicionales

Haciendo un repaso al enunciado se puede conseguir estas relaciones adicionales.

- Primero, el enunciado comenta que hay una relación de flujos entre C₆H₆ y Cl₂ de 1/3.6. Por tanto, teniendo en cuenta las corrientes a las que pertenecen, se obtiene que $F_1/F_2 = 1/3.6$.
- Por otra parte, aquí es donde entra en juego las composiciones comentadas en el anterior apartado. Como las composiciones de F₃ son en base libre de HCl y Cl₂, habrá que obtener relaciones entre los componentes que especifican su composición. Se puede obtener estas relaciones respecto a cualquier componente que pertenezca a la composición especificada, pero en este caso se realizará respecto al propio Benceno. Por tanto, las relaciones adicionales que se pueden obtener son:

$$X_{M3}/X_{B3} = 0.07$$

$$X_{D3}/X_{B3} = 0.12$$

$$x_{T3}/x_{B3}=0.75$$

$$x_{F3}/x_{B3}=0.05$$

No se ha obtenido la relación del propio benceno respecto a si mismo porque daría un valor igual a 1 y esto no proporciona información alguna. Resumiendo, **hay 5 relaciones adicionales.**

Ya obtenido todo lo anterior, se procede a calcular el número de GDL existente en el problema como se observa en la Tabla 2.

		Número	Identificación
Variables independientes		13	$F_1, F_2, F_3, x_{H3}, x_{C3}, x_{B3}, x_{D3}, x_{T3}, x_{F3}, R_1, R_2, R_3, R_4$
Ecuaciones de BM independientes		7	Veáse Tabla 1
Variables independientes especificadas	Flujos	1	$F_1=1000 \text{ mol/h}$
	Composiciones	0	
	Vel. reacción	0	
Relaciones adicionales		5	$F_1/F_2=1/3.6, x_{M3}/x_{B3}=0.07, x_{D3}/x_{B3}=0.12, x_{T3}/x_{B3}=0.75, x_{F3}/x_{B3}=0.05$
GDL		0	Problema especificado correctamente

Tabla 2. Tabla resumen grados de libertad

El problema está especificado correctamente y se puede resolver. Por ello, en la Figura 4 se observa de forma esquemática el proceso con sus correspondientes variables ya calculadas.

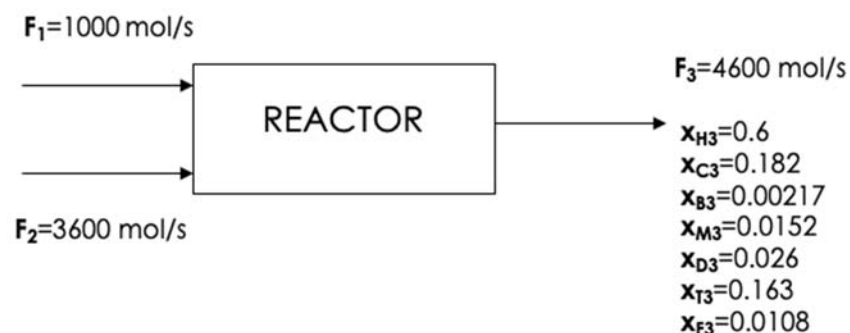


Figura 4. Resolución del problema planteado

Ya obtenido el valor de todas las variables del proceso, se procede a calcular el último apartado, el cual es conocer la conversión del benceno en el reactor.

¿Cómo se calcula la conversión de un componente?

La conversión nos indica que cantidad (porcentual) de un determinado componente ha reaccionado durante un proceso. En este caso, conociendo la cantidad de Benceno que entra en el reactor y la cantidad que sale, es posible conocer que cantidad ha reaccionado. La conversión se puede calcular por tanto con la siguiente fórmula:

$$X_B(\%) = \frac{F_1 - F_3 \cdot x_{B3}}{F_1} \cdot 100 = \frac{1000 \frac{\text{mol}}{\text{s}} - 4600 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \cdot 0.00217}{1000 \frac{\text{mol}}{\text{s}}} \cdot 100 = 99\%$$

Por tanto, la conversión del benceno en el reactor es del 99%.

Concluyendo los resultados obtenidos, cabe destacar que el producto objetivo, el triclorobenceno, tras el proceso de cloración del benceno representa un 16,3% del total de la corriente de salida. Por otra parte, el subproducto HCl, presenta la mayor cantidad obtenida en el proceso, por lo que podría ser un producto importante e intentar darle un valor en el mercado. Para concluir, cabe destacar que la cantidad Cl₂ que sale del reactor es del 18,2%. **¿Esto tiene sentido?** La respuesta es sí, ya que la relación de flujo dada por el enunciado (1/3.6) era exactamente para que el Benceno tuviera una alta conversión. Por tanto, el Benceno era el reactivo limitante en la alimentación.

5 Conclusiones

Las reacciones químicas intervienen en muchos procesos industriales, por lo que su correcto entendimiento es crucial para cualquier ingeniero químico. La aparición de múltiples reacciones en estos procesos complica la tarea si no se tiene una clara metodología de resolución. En el presente artículo docente se ha detallado una metodología para la resolución de este tipo de procesos. Mediante un ejemplo se ha podido mostrar de forma detallada la metodología que se debe seguir, aconsejando al alumno paso a paso y respondiendo preguntas que le podría surgir mientras se realiza la resolución.

6 Bibliografía

[1] Rojas González, Andrés Felipe. Fundamentos de procesos químicos.

[2] Monsalvo Vázquez, Miranda Pascual, Muñoz Pérez, and Romero Sánchez. M^a. del Rocío. 2009. Balance de materia y energía. México: Grupo Editorial Patria.