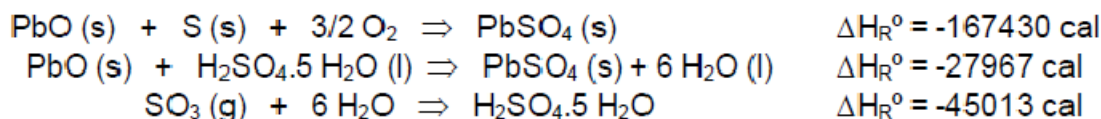


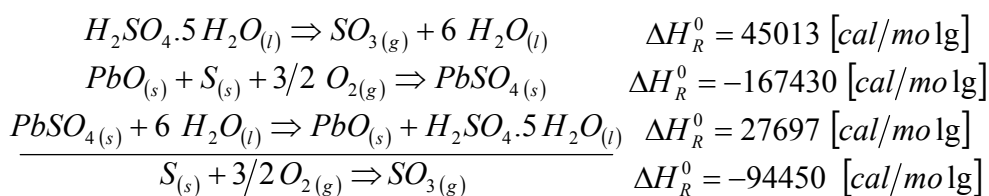
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUIMICA
CATEDRA DE “Balances de Materia y Energía”

UNIDAD 5: TERMOQUÍMICA

Problema N° 1: Calcular el calor de formación en calorías por mol-gramo del SO_3 (g) a partir de los siguientes datos experimentales de calores normales de reacción:

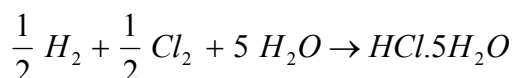


Solución:



Según Perry= -94390 [cal/mol]

Problema N° 2: Calcular el calor de formación estándar del HCl con 5 moles de agua.



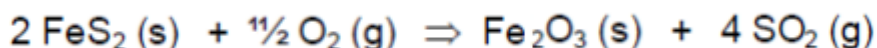
ΔH_F^0 : -22,063 [Kcal/mol]

ΔH_{disol} 5moles de agua: -15,000 [Kcal/mol]

ΔH_F : $\Delta H_F^0 + \Delta H_{\text{disol}}$ = -37,063 [Kcal/mol]

Según Perry= -39,85 [Kcal/mol] (400 aq)

Problema N° 3: Calcular el calor normal de reacción de la siguiente reacción:



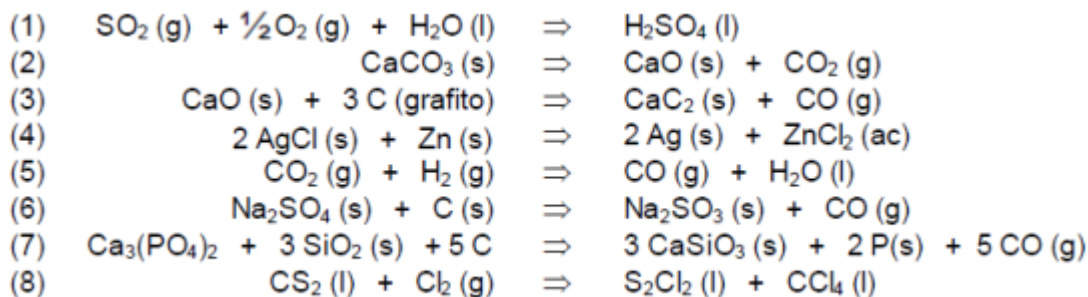
Solución:

Valores extraídos de “Selected values of chemicals thermodynamics properties” por D.D. Wagman National Bureau Standards

$$(-196,5 + 4 \times (-70,96)) - (2 \times (-42,52) + 0)$$

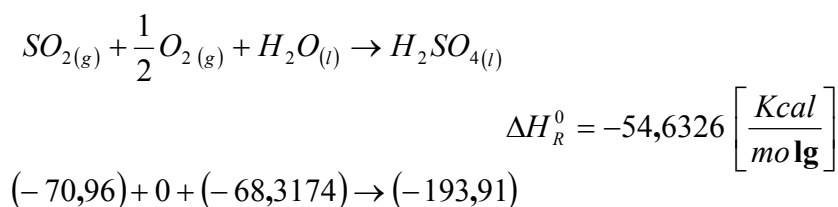
ΔH_R^0 = -395,3 [Kcal/mol g]

Problema N° 4: A partir de los datos de calores de formación, calcular los calores normales de reacción de las siguientes reacciones, en kilocalorías por mol·kg.

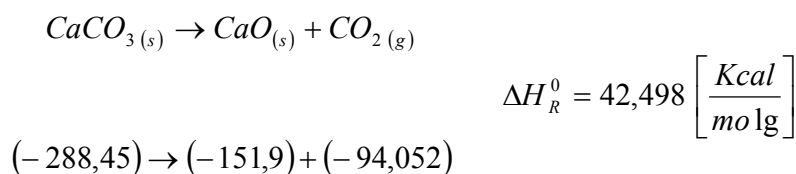


Solución:

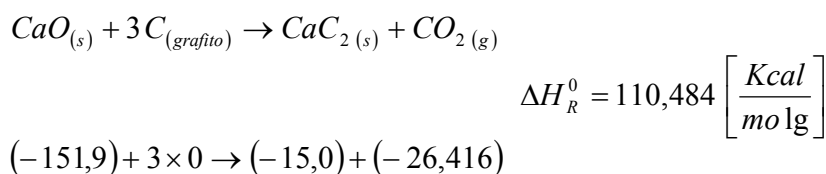
1)



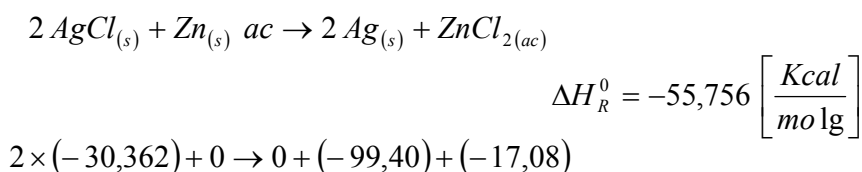
2)



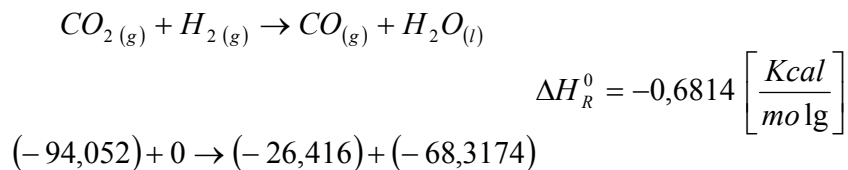
3)



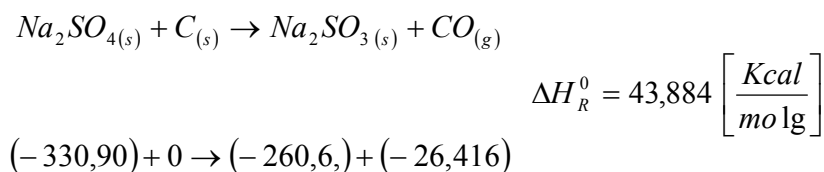
4)



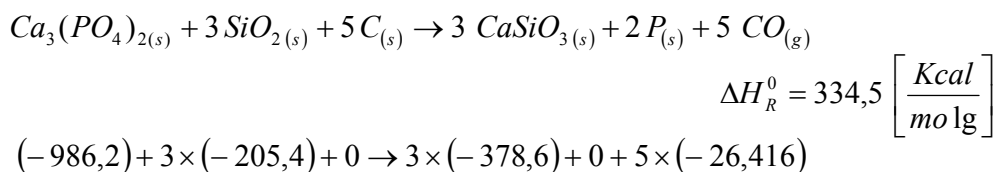
5)



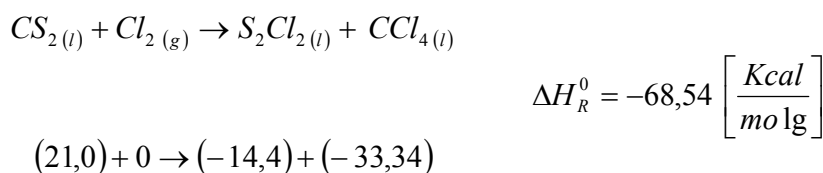
6)



7)



8)



Problema N° 5: Calcular los calores de formación de los siguientes compuestos a partir de los calores normales de combustión:

(1) Benceno (C₆H₆)_(l)

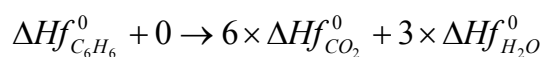
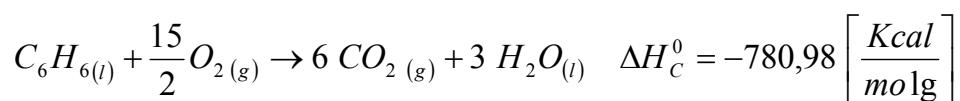
(2) Etilen glicol (C₂H₆O₂)_(l)

(3) Acido oxálico (COOH)_{2(s)}

(4) Anilina (C₆H₅.NH₂)_(l)

Solución:

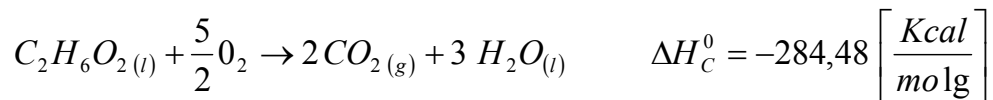
1)



$$\Delta H_f^0_{C_6H_6} = 6 \times (-94,052) + 3 \times (-68,3164) + 780,98 = 11,716 \left[\frac{Kcal}{mol\ g} \right]$$

Según Perry= 11,718 [Kcal/mol]

2)

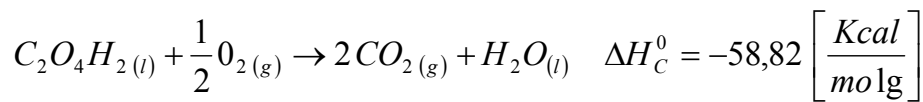


$$(\Delta H_f^0_{C_2H_6O_2}) + 0 \rightarrow 2 \times (\Delta H_f^0_{CO_2}) + 3 \times (\Delta H_f^0_{H_2O})$$

$$\Delta H_f^0_{C_2H_6O} = 2 \times (-94,052) + 3 \times (-68,3164) + 284,48 = -108,57 \left[\frac{Kcal}{mol\ g} \right]$$

Según Perry= -107,91 [Kcal/mol]

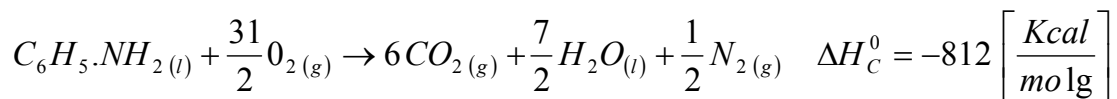
3)



$$\Delta H_f^0_{C_2O_4H_2} + 0 \rightarrow 2 \times \Delta H_f^0_{CO_2} + \Delta H_f^0_{H_2O}$$

$$\Delta H_f^0_{C_6O_4H_2} = 2 \times (-94,052) + (-68,3164) + 58,82 = -197,60 \left[\frac{Kcal}{mol\ g} \right]$$

4)



$$\Delta H_f^0_{C_6H_5.NH_2} + 0 \rightarrow 6 \times \Delta H_f^0_{CO_2} + \frac{7}{2} \Delta H_f^0_{H_2O}$$

$$\Delta H_f^0_{C_6H_5.NH_2} = 6 \times (-94,052) + \frac{7}{2}(-68,3164) + 812 = 8,577 \left[\frac{Kcal}{mol\ g} \right]$$

Problema N° 6: Los siguientes cambios de entalpía se determinaron experimentalmente para las reacciones que se indican a 25° C en condiciones termoquímicas estándar.

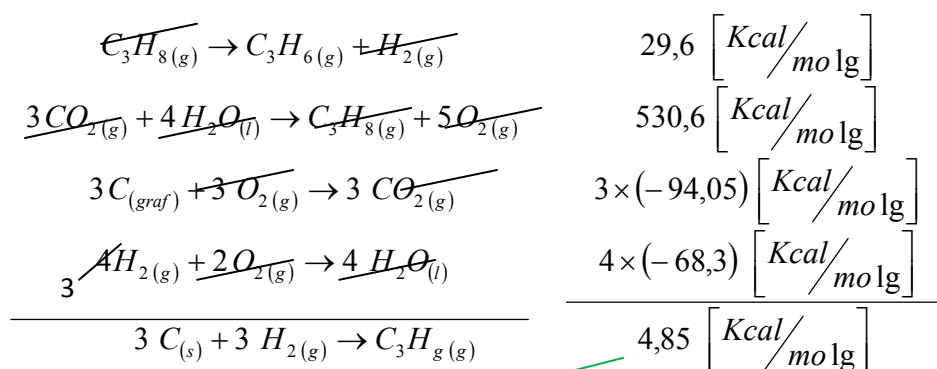
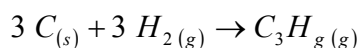
	Reacción	ΔH_R^0 (kcal/mol.gr)
(1)	$C_3H_8(g) + H_2(g) \Rightarrow C_3H_8(g)$	-29,6
(2)	$C_3H_8(g) + 5 O_2(g) \Rightarrow 3 CO_2(g) + 4 H_2O(l)$	-530,6
(3)	$H_2(g) + \frac{1}{2} O_2(g) \Rightarrow H_2O(g)$	-68,3
(4)	$H_2O(l) \Rightarrow H_2O(g)$	+ 10,5 (calor de vaporización)
(5)	$C(\text{diamante}) + O_2(g) \Rightarrow CO_2(g)$	-94,50
(6)	$C(\text{grafito}) + O_2(g) \Rightarrow CO_2(g)$	- 95,05

Calcular:

- El calor de formación estándar del propileno.
- El calor de combustión estándar del propileno.

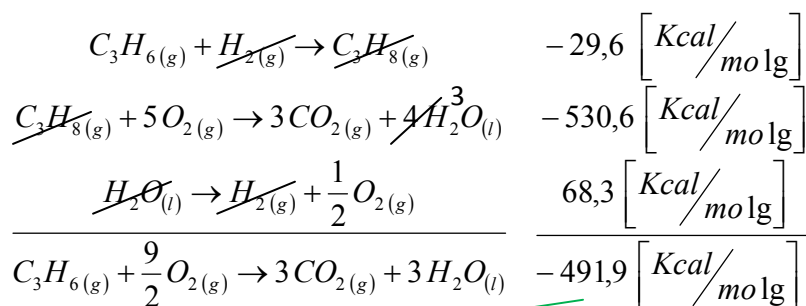
Solución:

a)



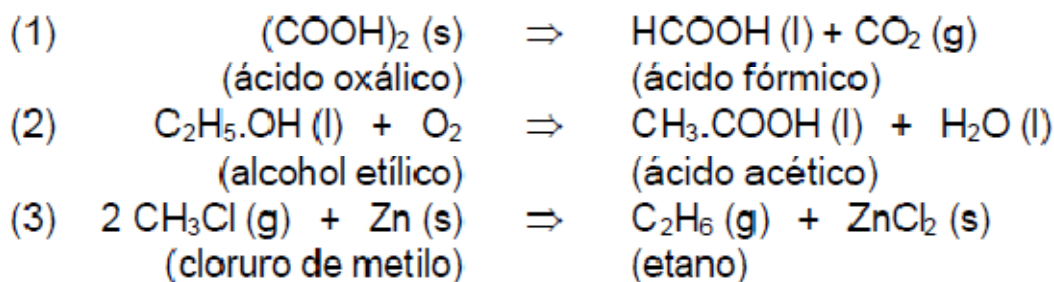
Según Perry= 4,879 [Kcal/mol]

b)

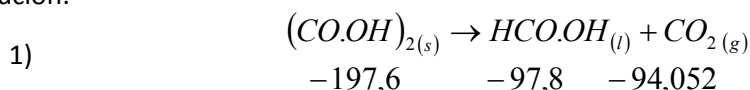


Según Perry= -491,987 [Kcal/mol]

Problema N° 7: Calcular los calores normales de reacción de las siguientes reacciones, expresadas en calorías por mol-gr:

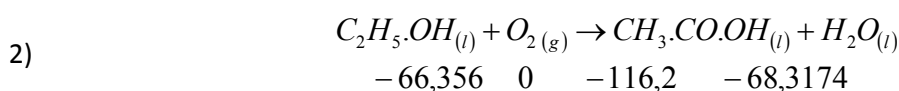


Solución:



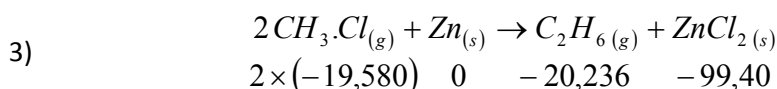
$$\Delta H_F^0 = \Delta H_{ac\ form}^0 + \Delta H_{CO_2}^0 - \Delta H_{ac\ oxalixico}^0$$

$$\Delta H_F^0 = (-97,8) + (-94,052) - (-197,6) = 5,748 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right]$$



$$\Delta H_F^0 = \Delta H_{ac\ ac}^0 + \Delta H_{H_2O}^0 - \Delta H_{etan\ ol}^0$$

$$\Delta H_F^0 = (-116,2) + (-68,3174) - (-66,356) = -118,1614 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right]$$



$$\Delta H_F^0 = \Delta H_{etan\ o}^0 + \Delta H_{ZnCl_2}^0 - \Delta H_{cloruro\ de\ etilo}^0$$

$$\Delta H_F^0 = (-20,236) + (-99,40) - 2 \times (-19,58) = -80,476 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right]$$

Problema N° 8: Si 10 kg de PbS y 3 kg de O₂ reaccionan para formar 6 kg de Pb y 1 kg de PbO₂ y el único producto adicional es el SO₂, ¿cuál es el calor de reacción total a 25° C y 1 atm?

$$\begin{array}{lll}
 & \text{PbS}_{(s)} + \text{O}_{2(g)} & \rightarrow \text{Pb}_{(s)} + \text{SO}_{2(g)} \\
 & 239,26 \quad 31,999 & 207,2 \quad 64,059 \\
 & \overline{)6,928[\text{Kg}]} \leftarrow \overline{)0,927[\text{Kg}]} \leftarrow 6[\text{Kg}] \rightarrow \overline{)1,855[\text{Kg}]} \\
 & \left(-22,54 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right] \right) \times \frac{6928[\text{g}]}{239,26 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol g}} \right]} & \left(-70,96 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right] \right) \times \frac{1855[\text{g}]}{64,059 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol g}} \right]} \\
 & \Delta H_1^0 = (-2054,837)[\text{Kcal}] - (-652,667)[\text{Kcal}] = -1402,17[\text{Kcal}]
 \end{array}$$

$$\begin{array}{c}
 \text{PbS}_{(s)} + 2 \text{O}_{2(g)} \rightarrow \text{PbO}_{2(s)} + \text{SO}_{2(g)} \\
 239,26 \quad 63,996 \quad 239,199 \quad 64,059 \\
 \overline{1,000[\text{Kg}]} \leftarrow \overline{0,268[\text{Kg}]} \leftarrow 1[\text{Kg}] \rightarrow \overline{0,268[\text{Kg}]} \\
 \left(-22,54 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right] \right) \times \frac{1000[\text{g}]}{239,26 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol g}} \right]} \quad \left(-66,12 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right] \right) \times \frac{1000[\text{g}]}{239,199 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol g}} \right]} \quad \left(-70,96 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right] \right) \times \frac{268[\text{g}]}{64,059 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol g}} \right]}
 \end{array}$$

$$\Delta H_2^0 = (-276,423)[\text{Kcal}] + (-296,871)[\text{Kcal}] - (-94,2070)[\text{Kcal}] = -479,087[\text{Kcal}]$$

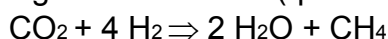
$$\Delta H_R^0 = \Delta H_1^0 + \Delta H_2^0 = (-1402,17)[\text{Kcal}] + (-479,087)[\text{Kcal}] = -1881,26[\text{Kcal}]$$

PbS=10 Kg reaccionan = 7,928 Kg quedan = 2,072 Kg

O₂= 3 Kg reaccionan = 1,195 Kg quedan =1,805 Kg

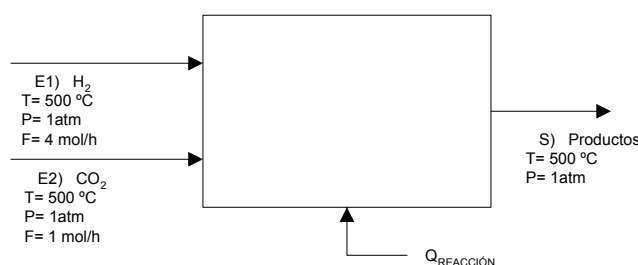
Productos: 2,072 Kg PbS, 1,805 Kg O₂, 6 Kg Pb, 1 Kg PbO₂, 2,123 Kg SO₂

Problema N° 9: Se ha desarrollado un nuevo catalizador con el cual la siguiente reacción (que se produce en fase gaseosa):



Se verifica en un 100 %. Determinar el calor que debe suministrarse o eliminarse si los reactantes y productos entran y salen a 500° C.-

Solución:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R^0 = 2 \times (-57,7979) \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right] + (-17,889) \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right] - (-94,052) \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right] = -39,433 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol g}} \right]$$

Entrada)

Comp	mol	$C_p [\text{Cal} / \text{mol} \cdot ^\circ \text{K}], T [^\circ \text{K}]$
CO ₂	1	$10,34 + 0,00274 \times T - 195500 / T^2$
H ₂	4	$6,62 + 0,00081 \times T$
Total	5	$36,82 + 5,98 \times 10^{-3} \times T - 195500 / T^2$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{773}^{298} (36,82 + 5,98 \times 10^{-3} \times T - 195500 / T^2) dT$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \left[36,82 \times T + \frac{5,98 \times 10^{-3}}{2} \times T^2 + 195500/T \right]_{773}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 36,82 \times (298 - 773) + \frac{5,98 \times 10^{-3}}{2} \times (298^2 - 773^2) + 195500 \times \left(\frac{1}{298} - \frac{1}{773} \right)$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = -17.489 - 1.521 + 403 = -18.607 \left[\frac{\text{cal}}{\text{hr}} \right] = -18,607 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{hr}} \right]$$

Salida)

Comp	mol	$C_p [\text{Cal} / \text{mol} \cdot ^\circ \text{K}], T [^\circ \text{K}]$
H_2O	2	$8,22 + 0,00015 \times T + 0,00000134 \times T^2$
CH_4	1	$5,34 + 0,0115 \times T$
Total	3	$21,78 + 0,0118 \times T + 2,68 \times 10^{-6} \times T^2$

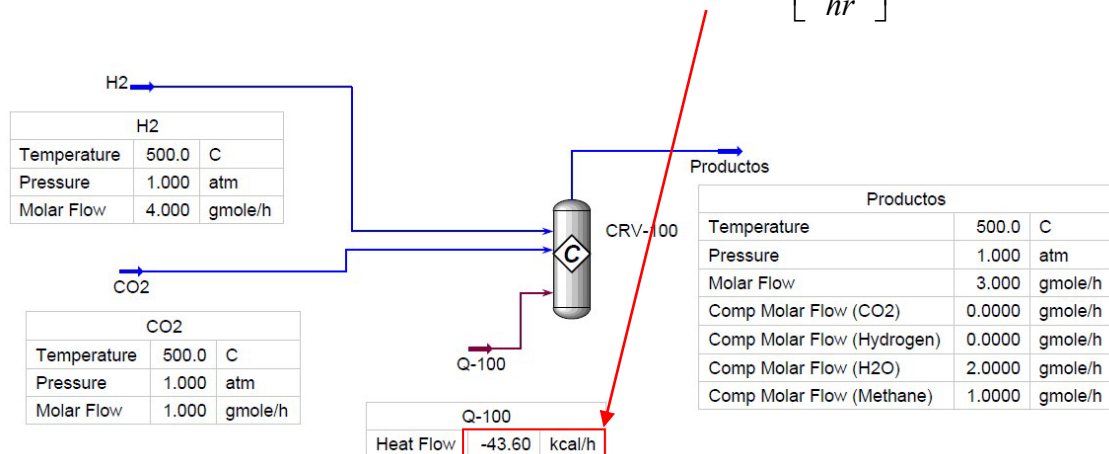
$$\Delta H_{\text{Productos}} = \int_{298}^{773} (21,78 + 0,0118 \times T + 2,68 \times 10^{-6} \times T^2) dT$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = \left[21,78 \times T + \frac{0,0118}{2} \times T^2 + \frac{2,68 \times 10^{-6}}{3} \times T^3 \right]_{298}^{773}$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = 21,78 \times (773 - 298) + \frac{0,0118}{2} \times (773^2 - 298^2) + \frac{2,68 \times 10^{-6}}{3} \times (773^3 - 298^3)$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = 10.345 + 3001 + 389 = 13.735 \left[\frac{\text{cal}}{\text{hr}} \right] = 13,735 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{hr}} \right]$$

$$\Delta H_R = -18,607 - 39,433 + 13,735 = -44,30 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{hr}} \right]$$



Problema N° 10: Determinar el calor de reacción de las siguientes reacciones a las temperaturas que se indican:

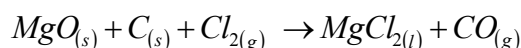
- (1) $\text{MgO (s)} + \text{C (s)} + \text{Cl}_2 \text{ (g)} \Rightarrow \text{MgCl}_2 \text{ (g)} + \text{CO (g)}$ 850° C
- (2) $\text{CH}_3.\text{OH (g)} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \text{ (g)} \Rightarrow \text{H}_2\text{CO (g)} + \text{H}_2\text{O (g)}$ 200° C
- (3) $\text{SO}_2 \text{ (g)} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \text{ (g)} \Rightarrow \text{SO}_3 \text{ (g)}$ 300° C

Solución problema 1:

A las condiciones expresadas (850 °C), el MgCl_2 es líquido (PF= 712 °C) mientras que el MgO es sólido (PF= 2800 °C). El calor de fusión del MgCl_2 es de 8.100 cal/mol (8,1 Kcal/mol). Además

no se dispone del Cp del mismo en estado líquido por lo que se tomará el correspondiente al sólido.

Solución 1:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}} + \Delta H_{\text{Fusión}}^{MgCl_2}$$

$$\Delta H_R^0 = [(-153,22) + (-26,416)] - [(-143,84) + 0 + 0] = -35,796 \left[\frac{Kcal}{mol} \right]$$

$$\Delta H_{\text{Fusión}}^{MgCl_2} = 8,1 \left[\frac{Kcal}{mol} \right]$$

Entrada)

Componente	moles	$Cp \left[\frac{cal}{mol \times ^\circ K} \right], T [^\circ K]$
MgO	1	$10,86 + 0,001197 \times T - 208700/T^2$
C	1	$2,673 + 0,002617 \times T - 116900/T^2$
Cl ₂	1	$8,28 + 0,00056 \times T$
Total	3	$21,813 + 4,374 \times 10^{-3} \times T - 325600/T^2$

Salida)

Componente	moles	$Cp \left[\frac{cal}{mol \times ^\circ K} \right], T [^\circ K]$
MgCl ₂	1	$17,3 + 0,00377 \times T$
CO	1	$6,60 + 0,0012 \times T$
Total	2	$23,9 + 4,97 \times 10^{-3} \times T$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{1123}^{298} (21,813 + 4,374 \times 10^{-3} \times T - 325600/T^2) dT$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \left| 21,813 \times T + \frac{4,374 \times 10^{-3}}{2} \times T^2 + \frac{325600}{T} \right|_{1123}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 21,813 \times (298 - 1123) + \frac{4,374 \times 10^{-3}}{2} \times (298^2 - 1123^2) + 325600 \times \left(\frac{1}{298} - \frac{1}{1123} \right)$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = -17.995 - 2564 + 802,7 = -19.756 = -19,756 \left[\frac{Kcal}{mol} \right]$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = \int_{298}^{1123} (23,9 + 4,97 \times 10^{-3} \times T) dT$$

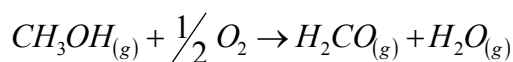
$$\Delta H_{\text{Productos}} = \left| 23,9 \times T + \frac{4,97 \times 10^{-3}}{2} \times T^2 \right|_{298}^{1123}$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = 23,9 \times (1123 - 298) + \frac{4,97 \times 10^{-3}}{2} \times (1123^2 - 298^2)$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = 19.717 + 2913 = 22.630 = 22,63 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

$$\Delta H_R = -19,756 - 35,796 + 22,63 + 8,1 = -24,822 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Solución 2:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

A 200 °C, todos los componentes son gaseosos, mientras que a 25 °C el metanol es líquido. A fin de evitar la necesidad del dato de calor latente se empleará el calor de formación normal para la fase gaseosa directamente. Los valores son:

$$\Delta H_R^0 = [(-28,29) + (-57,7979)] - [(-48,04) + 0] = -38,01 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Entrada)

Componente	n	Cp [Cal / mol °C] t [°C]
CH ₃ OH _(g)	1	10,26 + 1,984 × 10 ⁻² × t
O _{2(g)}	0,5	7,129 + 1,407 × 10 ⁻³ × t
Total	1,5	13,82 + 0,02054 × t

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{200}^{25} (13,82 + 0,02054 \times t) dt$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \left| 13,82 \times t + \frac{0,02054}{2} \times t^2 \right|_{200}^{25}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 13,82 \times (25 - 200) + \frac{0,02054}{2} \times (25^2 - 200^2)$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = -2418,5 - 404,4 = -2822,9 = -2,823 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Salida)

Componente	n	Cp [Cal / mol °C] t [°C]
H ₂ CO _(g)	1	8,192 + 1,020 × 10 ⁻² × t
H ₂ O _(g)	1	7,980 + 0,32 × 10 ⁻² × t
Total	2	16,072 + 0,0134 × t

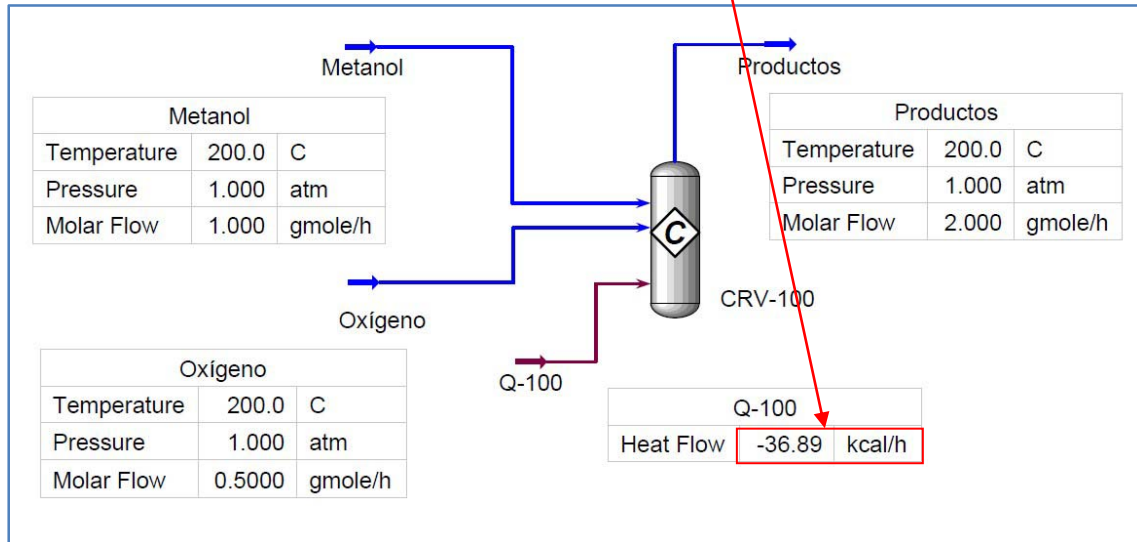
$$\Delta H_{\text{Productos}} = \int_{25}^{200} (16,072 + 0,0134 \times t) dt$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = \left| 16,072 \times t + \frac{0,0134}{2} \times t^2 \right|_{25}^{200}$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = 16,072 \times (200 - 25) + \frac{0,0134}{2} \times (200^2 - 25^2)$$

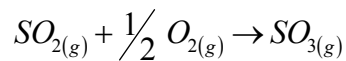
$$\Delta H_{\text{Productos}} = 2812,6 + 263,8 = 3076,4 = 3,076 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

$$\Delta H_R = -2,823 - 38,01 + 3,076 = -37,76 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$



Valores bastante cercanos considerando que sólo se tomaron los términos lineales del CP.

Solución 3:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

A 300 °C todos los componentes son gaseosos. A 25 °C, el SO₃ es líquido. Al igual que antes se tomará el calor normal de formación en estado gaseoso. Nos queda:

$$\Delta H_R^0 = [(-94,39)] - [(-70,94) + 0] = -23,45 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Entrada)

Componente	n	Cp [Cal / mol ° K] T [° K]
SO _{2(g)}	1	7,70 + 0,0053 × T
O _{2(g)}	0,5	8,27 + 0,000258 × T
Total	1,5	11,835 + 5,429 × 10 ⁻³ × T

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{573}^{298} (11,835 + 5,429 \times 10^{-3} \times T) dT$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \left[11,835 \times T + \frac{5,429 \times 10^{-3}}{2} \times T^2 \right]_{573}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 11,835 \times (298 - 573) + \frac{5,429 \times 10^{-3}}{2} \times (298^2 - 573^2)$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = -3254 - 650,2 = -3904 = -3,904 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Salida)

Componente	n	Cp [Cal/mol °K]	T[°K]
SO ₃	1	6,077 + 0,023537 × T	

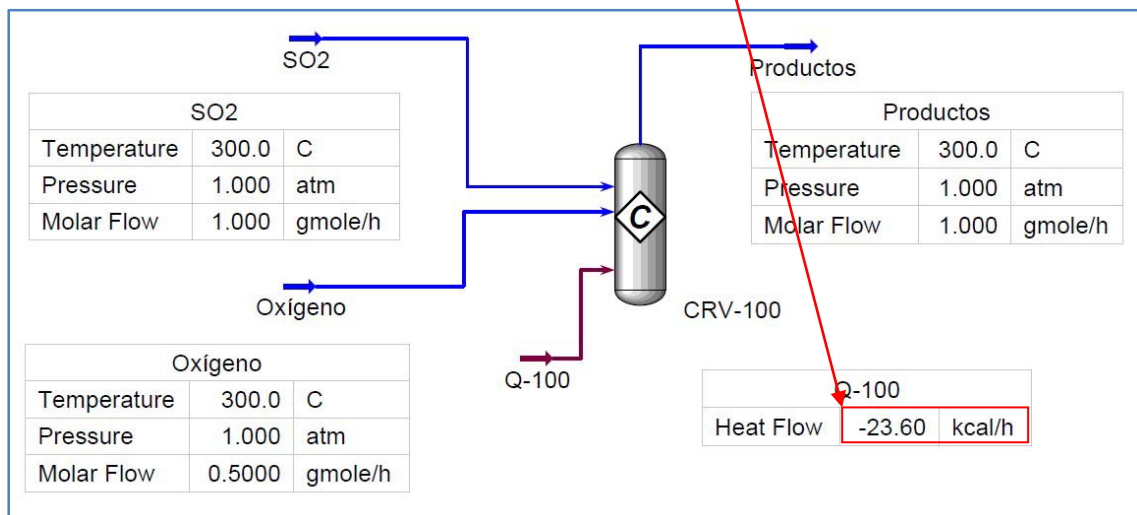
$$\Delta H_{\text{Productos}} = \int_{298}^{573} (6,077 + 0,023537 \times T) dT$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = \left[6,077 \times T + \frac{0,023537}{2} \times T^2 \right]_{298}^{573}$$

$$\Delta H_{\text{Productos}} = 6,077 \times (573 - 298) + \frac{0,023537}{2} \times (573^2 - 298^2)$$

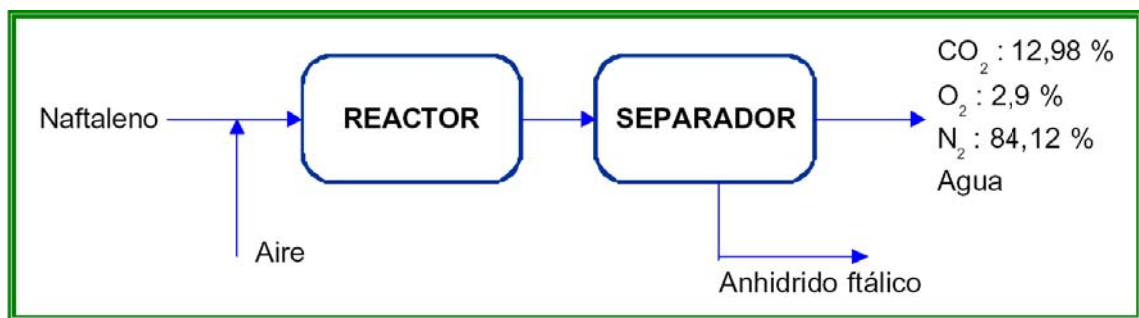
$$\Delta H_{\text{Productos}} = 1671,2 + 2819 = 4490 = 4,490 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

$$\Delta H_R = -3,904 - 23,45 + 4,49 = -22,86 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

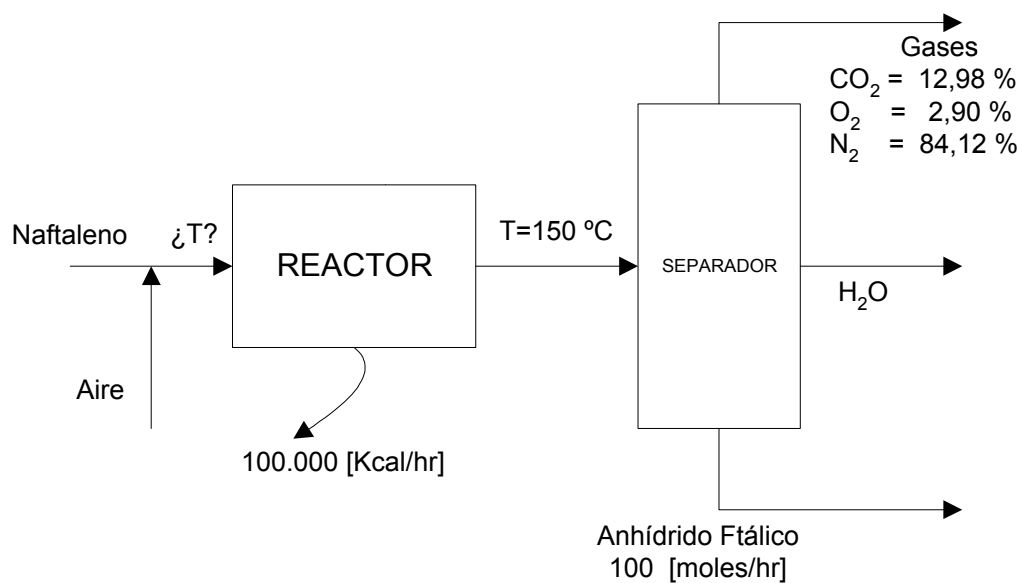


Valores bastantes cercanos considerando que sólo se tomaron los términos lineales del CP.

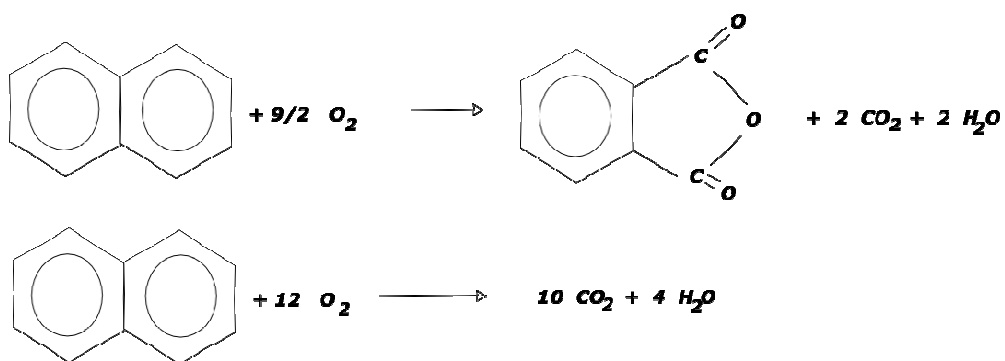
Problema N° 11: El anhídrido ftálico se produce por oxidación catalítica del naftaleno por medio de aire utilizando un reactor continuo. En el separador (ver figura) se obtienen un gas seco que tiene la siguiente composición: CO₂: 12,98 %; O₂: 2,9 %; N₂: 84,12 %. la producción de anhídrido ftálico es de 100 moles/hr. Los productos salen del reactor a 150° C. Aparte de la reacción de oxidación, se produce la de combustión completa del naftaleno a CO₂ y H₂O. Determinar la temperatura que deben entrar los productos para que se extraigan del reactor 100.000 kcal/hr en la camisa de refrigeración.-



Solución:



Reacciones:



Se tomará primero como base 100 moles de gases de salida.

- a) Como salen 84,12 moles de N_2 , como es elemento de correlación significa que entran 84,12 moles de N_2 y por lo tanto:

$$84,12 \times \frac{21}{79} = 22,36 \text{ moles de } O_2$$

$$\frac{84,12}{0,79} = 106,48 \text{ moles de aire} \left\{ \begin{array}{l} 84,12 \text{ } N_2 \\ 22,36 \text{ } O_2 \end{array} \right.$$

b) Si entran 22,36 moles de O_2 y salen 2,90 moles, significa que reaccionan
 $22,36 - 2,90 = 19,46$ mole de O_2

c) Estos 19,46 moles de O_2 se tendrán que repartir en las reacciones (1) y (2).
 Supongamos que se consumen x moles de naftaleno en la reacción (1) y Y moles en la
 reacción (2). Por lo tanto, planteando un balance para el O_2 y para el CO_2 .

$$\begin{aligned} \frac{9}{2} \times X + 12 \times Y &= 19,46 \\ 2 \times X + 10 \times Y &= 12,98 \end{aligned}$$

De la segunda ecuación:

Reemplazando en la primera

$$\frac{9}{2} \times (6,49 - 5 \times Y) + 12 \times Y = 19,46$$

$$Y = 0,928$$

$$X = 1,850$$

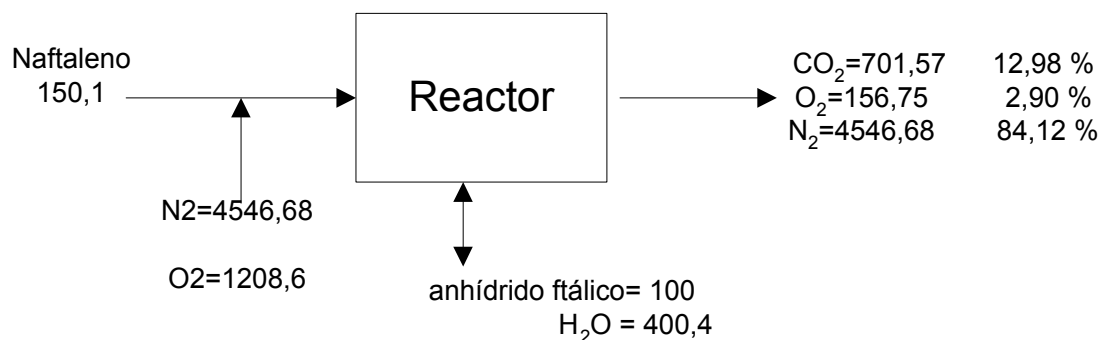
Es decir que por cada 1,85 de naftaleno que se consumen en la reacción (1), 0,928 lo hacen en la (2), o sea la relación:

$$\begin{aligned} \frac{1,85}{0,928} &= 1,99 \quad 1,99 \text{ de la (1) a 1 de (2)} \\ \frac{0,928}{1,85} &= 0,501 \quad 1 \text{ de la (1) a } 0,501 \text{ de (2)} \end{aligned}$$

Como salen 100 moles de anhídrido ftálico producto de la reacción (1), significa que en la (2) se deben consumir $100 \times 0,501 = 50,1$ moles de naftaleno, por lo que corrigiendo para 100 moles de anhídrido ftálico.

Reacción (1) = 100 de naftaleno

Reacción (2) = 50,1 de naftaleno



Para 1,85 moles de naftaleno → 100 moles de gases secos
100 → x = 5405 moles

Compuesto	ΔH_f°	CP	T
	(Kcal/molg)	[cal/molg °K]	[°K]
Naftaleno	36,111	18,05 + 0,0694 T	
Anhídrido ftálico	-88,862	13,42 + 0,0580 T	
CO ₂	-94,052	10,34 + 0,00274 T	
N ₂		6,50 + 0,00100 T	
O ₂		8,27 + 0,000258 T	
H ₂ O	-57,7979	8,22 + 0,00015 T	

Determinación de la temperatura de entrada de los reactantes

a) Determinación de ΔH_R :

<i>Naftaleno</i>	$150,1 \times (18,05 + 0,0694 \times T)$
<i>Nitrógeno</i>	$4547 \times (6,50 + 0,00100 \times T)$
<i>Oxígeno</i>	$1209 \times (8,27 + 0,000258 \times T)$
<i>Total</i>	$42263 + 15,27 \times T$

$$\begin{aligned}\Delta_R &= 42263 \times (298 - T) + \frac{15,27}{2} (298^2 - T^2) \\ &= 12594444 - 42263 \times T + 678279 - 15,27 T^2 \\ &= -7,638 \times T^2 - 42263 \times T + 1,327 \times 10^7\end{aligned}$$

b) Determinación de ΔH_R° :

Reacción (1)	$100 \times [2(-57,7979) + 2(-94,012) + (-88,862) - (36,111)]$
Reacción (2)	$50,1 \times [4(-57,7979) + 10(-94,052) - (36,111)]$
Total	$(-42867,28 - 60511,9123) = -103379 [Kcal] = -1,0338 \times 10^8 [cal]$

c) Determinación de ΔH_R :

<i>Anhídrido ftálico</i>	$100 \times (13,42 + 0,0580 \times T)$
H_2O	$400,4 \times (8,22 + 0,00015 \times T)$
CO_2	$701,6 \times (10,34 + 0,00274 \times T)$
O_2	$156,8 \times (8,27 + 0,000258 \times T)$
N_2	$4547 \times (6,50 + 0,00100 \times T)$
<i>total</i>	$42740 + 12,37 \times T$

$$\Delta H_P = \int_{298}^{423} (42740 + 12,37 \times T) dT = 42740 \times (423 - 298) + \frac{12,37}{2} (423^2 - 298^2)$$

$$= 5,900 \times 10^6 [cal]$$

d) Determinación de la temperatura de entrada:

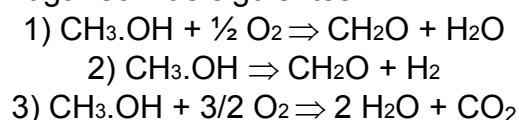
$$\Delta H_R + \Delta H_r^0 + \Delta H_P + Q = 0$$

$$-7,638 \times T^2 - 42263 \times T + 1,327 \times 10^7 - 1,0338 \times 10^8 + 5,900 \times 10^6 + 1,0 \times 10^8 = 0$$

$$-7,638 \times T^2 - 42263 \times T + 1,579 \times 10^7 = 0$$

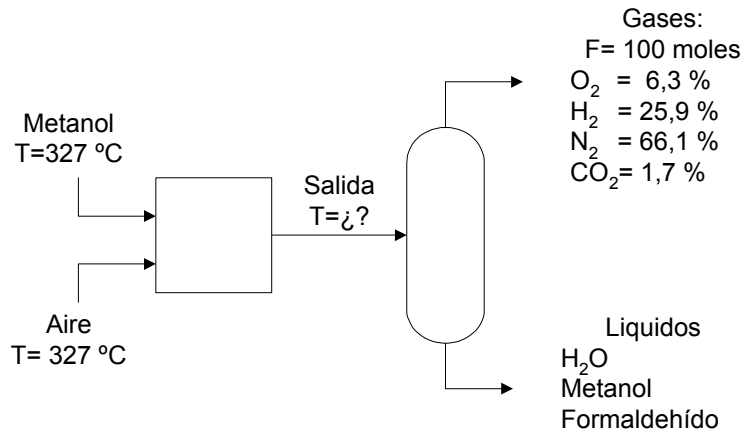
$$T = 351 [^\circ K] = 78,3 [^\circ C]$$

Problema N° 12: En presencia de un catalizador de plata metálica se puede producir formaldehído a partir del metanol, por oxidación con oxígeno. Las reacciones que tienen lugar son las siguientes:

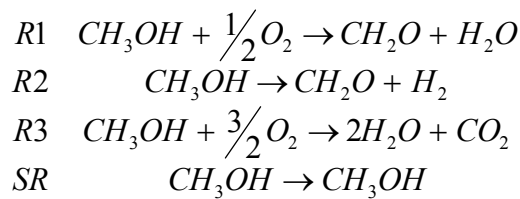


Para realizar esto se utiliza un reactor adiabático y la reacción de alimentación metanol - aire es 1:1,3 en base molar y entran a una temperatura de 327° C. El análisis de los productos gaseosos, después de separar el metanol no reaccionado y el formaldehído producido es la siguiente: O₂: 6,3 %; H₂: 25,9 %; N₂: 66,1 %; CO₂: 1,7 %. Determinar la temperatura de salida de los productos.

Solución:



Reacciones:



Base: 100 moles de gas de salida seco:

Hidrógeno)

Sale 25,9 [mol] implica que por R2 se produce 25,9 [mol] de formaldehído y consume 25,9 [mol] de metanol

Dióxido de carbono)

Sale 1,7 [mol] por lo que sale $2 \times 1,7 = 3,4$ [mol] de agua por R3 y consume 1,7 [mol] de metanol y $\frac{3}{2} \times 1,7 = 2,55$ [mol] de Oxígeno

Nitrógeno)

Sale 66,1 [mol] y como no interviene en ninguna reacción, entra 66,1 [mol]

Oxígeno)

En la entrada acompaña al N_2 : $66,1 \times 21/79 = 17,57$ [mol] de Oxígeno entra y 6,3 [mol] que salen por lo que:

$17,57 - 6,3 = 11,27$ [mol] de Oxígeno reaccionan.

Como 2,55 [mol] reaccionan en R3: $17,57 - 2,55 = 8,72$ [mol] reaccionan de O_2 en R1.

Aire)

$17,57$ [mol] de O_2 + $66,1$ [mol] de $N_2 = 83,67$ [mol] de aire

Metanol)

Como la relación metanol-aire es de 1:1,3 y entran 83,67 [mol] de aire, lo acompaña: $83,67 \times 1/1,3 = 64,36$ [mol] de Metanol. El metanol que no reacciona es:

$SR = \text{Total} - R1 - R2 - R3 = 64,36 - 17,44 - 25,9 - 1,7 = 19,32$ [mol].

R1	$CH_3OH + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CH_2O + H_2O$	27,09 %
	17,44 8,72 17,44 17,44	
R2	$CH_3OH \rightarrow CH_2O + H_2$	40,24%
	25,9 25,9 25,9	
R3	$CH_3OH + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow 2H_2O + CO_2$	2,64 %
	1,7 2,55 3,4 1,7	
SR	19,32	30,03 %

$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_{R1}^0 + \Delta H_{R2}^0 + \Delta H_{R3}^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_{R1}^0 = 17,44 \times \{ [(-28,29) + (-57,7979)] - [(-48,08)] \} = -663,5 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right] = -663500 \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right]$$

$$\Delta H_{R2}^0 = 25,9 \times \{ [(-28,29)] - [(-48,08)] \} = 512,6 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right] = 512600 \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right]$$

$$\Delta H_{R3}^0 = 1,7 \times \{ [2 \times (-57,7979) + (-94,052)] - [(-48,08)] \} = -274,7 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right] = -274700 \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right]$$

Entrada)

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
CH_3OH	64,36	$5,052 + 0,01692 \times T$
O_2	17,57	$8,27 + 0,000258 \times T$
N_2	66,1	$6,50 + 0,001 \times T$
Total	148,0	$900,1 + 1,200 \times T$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{600}^{298} (900,1 + 1,200 \times T) dT = \left| 900,1 \times T + \frac{1,200}{2} \times T^2 \right|_{600}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 900,1 \times (298 - 600) + \frac{1,200}{2} \times (298^2 - 600^2) = -597265 \text{ [cal]}$$

Salida)

Formaldehído)

$$17,44 + 25,9 = 43,34 \text{ [mol]}$$

Agua)

$$17,44 + 3,4 = 20,84 \text{ [mol]}$$

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
CH_3OH	19,32	$5,052 + 0,01692 \times T$
CH_2O	43,34	$6,306 + 4,4216 \times 10^{-3} \times T$
H_2O	20,84	$8,22 + 0,00015 \times T$
H_2	25,9	$6,62 + 0,00081 \times T$
O_2	6,3	$8,27 + 0,000258 \times T$
N_2	66,1	$6,50 + 0,001 \times T$
CO_2	1,70	$10,34 + 0,00274 \times T$
Total	183,6	$1213 + 0,6150 \times T$

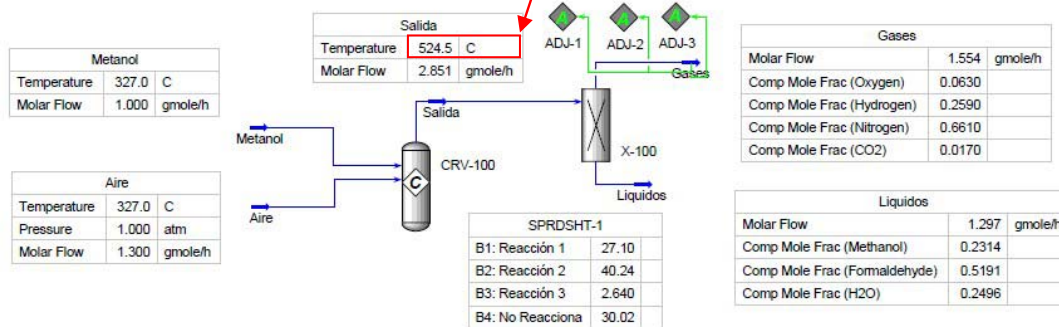
$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^T (1213 + 0,6150 \times T) dT = \left| 1213 \times T + \frac{0,6150}{2} \times T^2 \right|_{298}^T$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 1213 \times (T - 298) + \frac{0,6150}{2} \times (T^2 - 298^2)$$

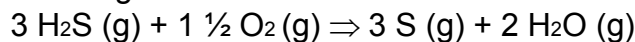
$$\Delta H_{\text{Producto}} = 0,3075 \times T^2 + 1213 \times T - 334166$$

$$\Delta H_R = 0,3075 \times T^2 + 1213 \times T - 1188887 = 0$$

$$T = 539 [^\circ C]$$



Problema N° 13: El azufre puede recuperarse del H_2S contenido en el gas natural por medio de la siguiente reacción:

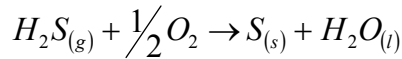


Si los reactantes entran al proceso a $300^\circ F$ y los productos salen del reactor a $100^\circ F$, calcular:

- El calor de reacción en BTU/lb de azufre formado suponiendo que la reacción es completa.
- El calor de reacción suponiendo un grado de consumación del 75 %.

Solución:

Como primera observación se aprecia que la ecuación está mal balanceada y además a la temperatura de salida ($37,8^\circ C$) el azufre se encuentra sólido y el agua líquida. Con estas observaciones:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R^0 = [(-68,3172)] - [-4,77] = -63,604 \left[\frac{Kcal}{mol} \right] = -63600 \left[\frac{cal}{mol} \right]$$

a) 100% de rendimiento

Base:

1 lb de S = 453,6 g $\rightarrow$ 453,6/32 = 14,18 [mol]

Entrada) T = 300 °F = 422 °K

Por cada mol de S que sale, entra 1 mol de H₂S y media de O₂, para 14,18 [mol]:

Comp	n	$C_p \left[\frac{cal}{mol \cdot K} \right] T [^\circ K]$
H ₂ S	14,175	$7,20 + 0,0036 \times T$
O ₂	7,087	$8,27 + 0,000258 \times T$
Total	21,263	$160,7 + 0,05286 \times T$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{422}^{298} (160,7 + 0,05286 \times T) dT = \left| 160,7 \times T + \frac{0,05286}{2} \times T^2 \right|_{422}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 160,7 \times (298 - 422) + \frac{0,05286}{2} \times (298^2 - 422^2) = -22208 [cal]$$

Salida) T = 100 °F = 311 °K

Por cada mol de S que sale, lo acompaña 1 mol de agua (asumimos cp constante de 1 cal/g °K).

Comp	n	$C_p \left[\frac{cal}{mol \cdot K} \right] T [^\circ K]$
S	14,175	$3,63 + 0,0064 \times T$
H ₂ O	14,175	18
Total	21,263	$306,6 + 0,0064 \times T$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^{311} (306,6 + 0,0064 \times T) dT = \left| 306,6 \times T + \frac{0,0064}{2} \times T^2 \right|_{298}^{311}$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 306,6 \times (311 - 298) + \frac{0,0064}{2} \times (311^2 - 298^2) = 4345 [cal]$$

$$\Delta H_R = -22208 + 14,175 \times (-63600) + 4345 = -919393 [cal] = -919,4 [Kcal]$$

$$\Delta H_R = -3646 \left[\frac{BTU}{Lb(S)_{formado}} \right]$$

b) 75 % de rendimiento:

Base: para una lb de S (14,175 gmol) se requieren 18,9 moles de H₂S y 9,45 de O₂ por lo que el problema queda ahora:

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
H_2S	18,9	$7,20 + 0,0036 \times T$
O_2	9,45	$8,27 + 0,000258 \times T$
Total	28,35	$214,2 + 0,07048 \times T$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{422}^{298} (214,2 + 0,07048 \times T) dT = \left[214,2 \times T + \frac{0,07048}{2} \times T^2 \right]_{422}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 214,2 \times (298 - 422) + \frac{0,07048}{2} \times (298^2 - 422^2) = -29707 [\text{cal}]$$

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
S	14,175	$3,63 + 0,0064 \times T$
H_2O	14,175	18
H_2S	4,725	$7,20 + 0,0036 \times T$
O_2	2,363	$8,27 + 0,000258 \times T$
Total	35,438	$360,2 + 0,1083 \times T$

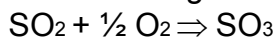
$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^{311} (360,2 + 0,1083 \times T) dT = \left[360,2 \times T + \frac{0,1083}{2} \times T^2 \right]_{298}^{311}$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 360,2 \times (311 - 298) + \frac{0,1083}{2} \times (311^2 - 298^2) = 5111 [\text{cal}]$$

$$\Delta H_R = -29707 + 14,175 \times (-63600) + 5111 = -926126 [\text{cal}] = -926,1 [\text{Kcal}]$$

$$\Delta H_R = -35726 \left[\frac{\text{BTU}}{\text{Lb}(S)_{\text{formado}}} \right]$$

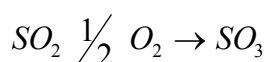
Problema N° 14: El SO_3 se obtiene de la siguiente reacción:



A $600^\circ C$ la reacción tiene un grado de consumación del 70 %. Si los reactantes entran al reactor a $25^\circ C$ y los productos salen a $600^\circ C$, determinar el calor desprendido o absorbido en esas condiciones por kmol de SO_3 .

Solución:

Debido a la fuertemente no linealidad del C_p del SO_3 se tomarán los C_p completos.



Base: 1 kmol de SO_3 producido.

SO_2)

Como se necesita 1 kmol de SO₂ cuando el rendimiento es del 100 %, para un rendimiento del 70 %: se requiere $1 \times 100 / 70 = 1,429$ [kmol]

O₂)

La cantidad estequiométrica sería: $1,429 / 2 = 0,7145$ [kmol]

N₂)

La cantidad que acompaña al O₂ es: $0,7145 \times 79 / 21 = 2,688$ [kmol]

$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R^0 = [(-94,39)] - [-70,74] = -23,45 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right] = -23450 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{kmol}} \right]$$

Como los reactantes entran a 25 °C el cambio de entalpía de los reactantes es cero.

Salida)

SO₃) 1 [kmol]

SO₂) $1,429 - 1 = 0,429$ [kmol]

O₂) $0,7145 - 0,500 = 0,2145$ [kmol]

N₂) 2,688 [kmol]

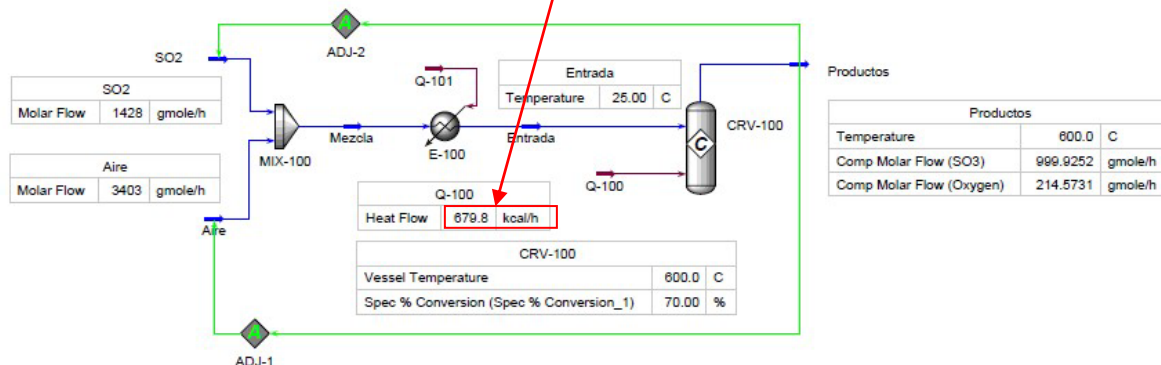
Comp	n [kmol]	Cp $\left[\frac{\text{Kcal}}{\text{kmol} \cdot ^\circ \text{K}} \right]$
SO ₃	1	$6,077 + 2,35 \times 10^{-2} \times T - 9,69 \times 10^{-6} \times T^2$
SO ₂	0,429	$7,7 + 5,30 \times 10^{-3} \times T - 8,30 \times 10^{-7} \times T^2$
O ₂	0,2145	$8,27 + 2,58 \times 10^{-4} \times T$
N ₂	2,688	$6,5 + 1,00 \times 10^{-3} - 0,069 \times 10^{-8} \times T^2$
Total	4,331	$28,626 + 0,02855 \times T - 1.10^{-5} \times T^2$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^{873} (28,626 + 0,02855 \times T - 1.10^{-5} \times T^2) dT =$$

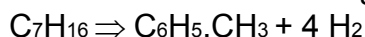
$$\Delta H_{\text{Producto}} = \left[28,626 \times T + \frac{0,02855}{2} \times T^2 - \frac{1 \times 10^{-5}}{3} \times T^3 \right]_{298}^{873}$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 23932 \text{ [Kcal]}$$

$$\Delta H_R = -23450 + 23932 = 482 \left[\frac{\text{kcal}}{\text{kmol SO}_3 \text{ formado}} \right]$$

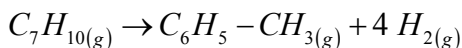


Problema N° 15: El heptano normal se deshidrocicliza en un proceso de reforma catalítica para formar tolueno mediante la siguiente reacción:



Suponiendo que tiene un grado de consumación del 35 % y que los reactantes y los productos entran y salen del reactor a 900° F, determinar cuánto calor se deberá entregar al reactor por cada 1000 lb. de tolueno producido.

Solución:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R^0 = [(11,95)] - [(-44,89)] = 56,84 \left[\frac{Kcal}{mol} \right] = 56840 \left[\frac{Kcal}{Kmol} \right]$$

Base: 1000 Lb de tolueno producido= 453[Kg] $\rightarrow$ 453/92=4,924 [Kmol]

$$\begin{array}{ccc} 1 \text{ Kmol (Tolueno)} & \rightarrow & 1 \text{ Kmol (Heptano)} \\ 4,924 & \rightarrow & 4,924 \rightarrow 35 \% \\ & & \langle 14,07 [Kmol] \rangle \leftarrow 100 \% \end{array}$$

Entrada) T=900 °F= 482 °C = 755 °K

Comp	n [Kmol]	$C_p \left[\frac{Kcal}{Kmol \cdot K} \right] T [^\circ K]$
C_7H_{10}	14,07	$1,343 + 0,1618 \times T$
Total	14,07	$18,89 + 2,276 \times T$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{755}^{298} (18,89 + 2,276 \times T) dT = \left[18,89 \times T + \frac{2,276}{2} \times T^2 \right]_{755}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 18,89 \times (298 - 755) + \frac{2,276}{2} \times (298^2 - 755^2) = -556262 [Kcal]$$

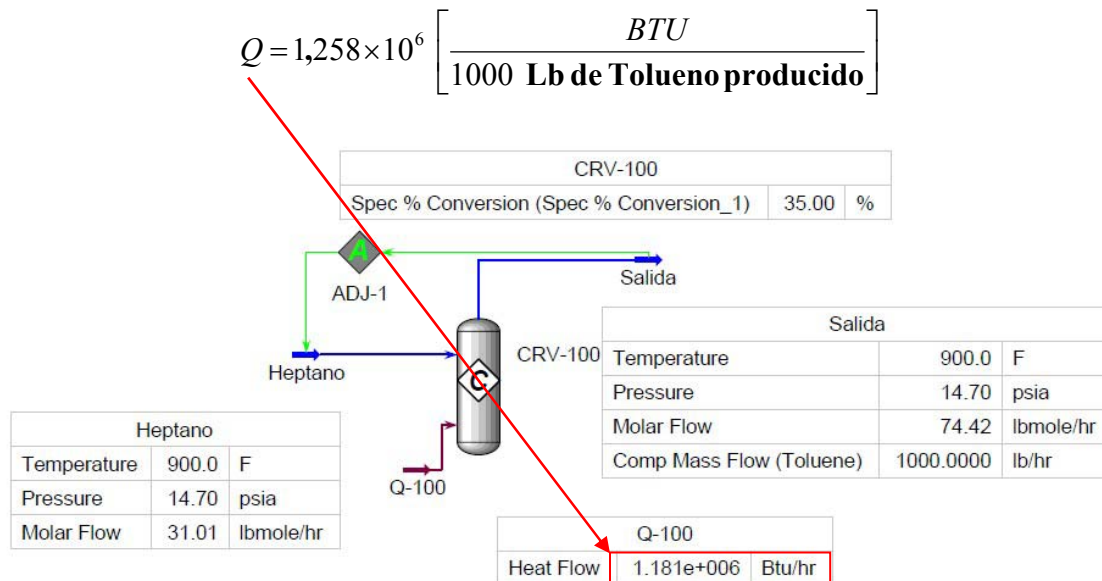
Salida) T=900 °F= 482 °C = 755 °K

Comp	n [Kmol]	$C_p \left[\frac{Kcal}{Kmol \cdot K} \right] T [^\circ K]$
C_7H_{10}	9,146	$1,343 + 0,1618 \times T$
$C_6H_5CH_3$	4,924	$-1,043 + 0,1442 \times T$
H_2	$4 \times 4,924 = 19,696$	$6,62 + 0,00081 \times T$
Total	33,77	$137,5 + 2,206 \times T$

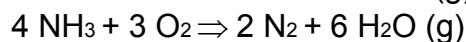
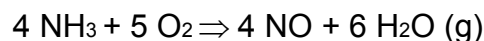
$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^{775} (137,5 + 2,206 \times T) dT = \left[137,5 \times T + \frac{2,206}{2} \times T^2 \right]_{298}^{775}$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 137,5 \times (775 - 298) + \frac{2,206}{2} \times (775^2 - 298^2) = 593880 [Kcal]$$

$$\Delta H_R = -556262 + 4,924 \times 56840 + 593880 = 317242 [Kcal]$$

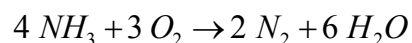
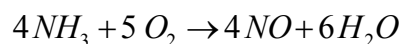


Problema N° 16: El ácido nítrico se obtiene por oxidación del amoníaco ya sea con oxígeno o con aire en presencia de un catalizador adecuado. Se pueden verificar las siguientes dos reacciones:



La primera reacción suministra el NO necesario para producir el HNO_3 , mientras que la segunda resulta una pérdida en nitrógeno fijo. A 1000° C el 92 % del NH_3 se convierte a NO, mientras que el resto se consume en la segunda reacción. Determinar el calor de reacción si los reactantes entran a 400° C y los productos salen a 1000° C , utilizando la cantidad estequiométrica de aire puro.

Solución:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_{R1}^0 + \Delta H_{R2}^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_{R1}^0 = [4 \times (21,6) + 6 \times (-57,7979)] - [4 \times (-10,96)] = -216,5 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

$$\Delta H_{R2}^0 = [6 \times (-57,7979)] - [4 \times (-10,96)] = -302,9 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Base: 1 mol de NH_3 .

O_2 (Teórico) = $0,92 \times 5/4 + 0,08 \times 3/4 = 1,21$ [mol]

O_2 (Entra) = 1,21 [mol]

O_2 (Sale) = 0

N_2 (Entra) = N_2 (Sale) = $1,21 \times 79/21 = 4,552$ [mol]

Entrada:

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
NH_3	1	$6,70 + 0,0063 \times T$
O_2	1,21	$8,27 + 0,000258 \times T$
N_2	4,552	$6,50 + 0,001 \times T$
	6,762	$45,55 + 0,01116 \times T$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{673}^{298} (45,55 + 0,01116 \times T) dT = \left| 45,55 \times T + \frac{0,01116}{2} \times T^2 \right|_{673}^{298}$$

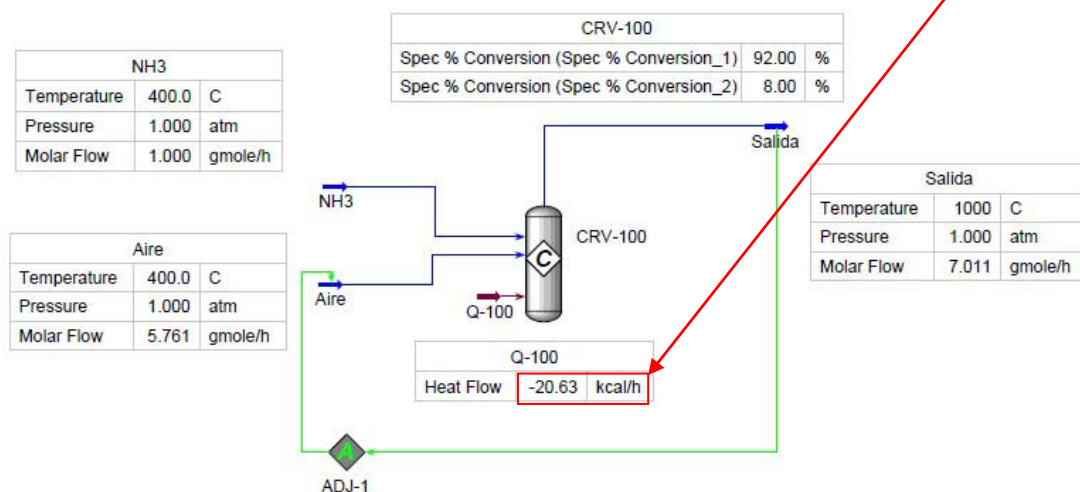
$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 45,55 \times (298 - 673) + \frac{0,01116}{2} \times (298^2 - 673^2) = -19113 \text{ [cal]}$$

Salida)

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
NO	$\frac{0,92 \times 4}{4} = 0,92$	$8,50 + 0,000233 \times T$
H_2O	$\frac{12}{8} = 1,5$	$8,22 + 0,00015 \times T$
N_2	$4,552 + \frac{0,08 \times 2}{4} = 4,592$	$6,50 + 0,001 \times T$
	7,012	$49,58 + 5,031 \times 10^{-3} \times T$

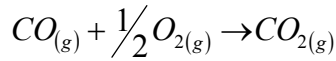
$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^{1273} (49,58 + 5,031 \times 10^{-3} \times T) dT = \left| 49,58 \times T + \frac{5,031 \times 10^{-3}}{2} \times T^2 \right|_{298}^{1273}$$

$$\Delta H_R = -19113 + 0,92 \times (-54140) + 0,08 \times (-75740) + 52193 = -22789 \text{ [cal]} = -22,789 \text{ [Kcal]}$$



Problema N° 17: El monóxido de carbono a 50° F se quema totalmente a 2 atm de presión con un 50 % de exceso de aire el cual se encuentra a 1000° F. Los productos de combustión salen de la cámara de combustión a 800° F. Calcular el calor desprendido en la cámara de combustión en BTU/lb de CO que entra.

Solución:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactante}} + \Delta H_{\text{Aire}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R^0 = [(-94,052)] - [(-26,416)] = -67,636 \left[\frac{Kcal}{mol} \right]$$

Entrada)

CO: 1 [Lb]=453,6 [gr] = 453,6/28= 16,2 [moles]

Aire (50 % exceso)

O₂ (teórico)= 16,2/2= , O₂ (entrada)= 1,5x8,1= 12,15 [moles]

N₂ =12,15x79/21= 44,71 [moles]

Comp	n	$C_p \left[\frac{Cal}{mol \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
CO	16,2	$6,60 + 0,0012 \times T$
Total	16,2	$106,9 + 0,01944 \times T$

Aire)

Comp	n	$C_p \left[\frac{Cal}{mol \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
O ₂	12,15	$8,27 + 0,00015 \times T$
N ₂	45,71	$6,50 + 0,001 \times T$
Total	57,86	$397,6 + 0,04884 \times T$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{283}^{298} (106,9 + 0,01944 \times T) dT = \left| 106,9 \times T + \frac{0,01944}{2} \times T^2 \right|_{283}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 106,9 \times (298 - 283) + \frac{0,01944}{2} \times (298^2 - 283^2) = 1688 [cal]$$

$$\Delta H_{\text{Aire}} = \int_{811}^{298} (397,6 + 0,04884 \times T) dT = \left| 397,6 \times T + \frac{0,04884}{2} \times T^2 \right|_{811}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Aire}} = 397,6 \times (298 - 811) + \frac{0,04884}{2} \times (298^2 - 811^2) = -217862 [cal]$$

Salida)

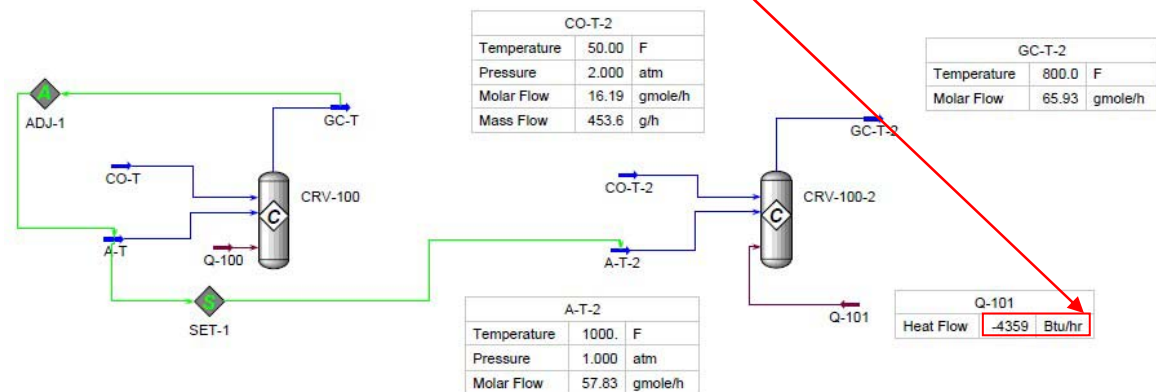
Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mol}^\circ \text{K}} \right] T [^\circ \text{K}]$
CO_2	16,2	$10,34 + 0,00274 \times T$
O_2	4,05	$8,27 + 0,00015 \times T$
N_2	45,71	$6,50 + 0,001 \times T$
Total	65,96	$498,1 + 0,09114 \times T$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^{700} (498,1 + 0,09114 \times T) dT = \left[498,1 \times T + \frac{0,09114}{2} \times T^2 \right]_{298}^{700}$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 498,1 \times (700 - 298) + \frac{0,09114}{2} \times (700^2 - 298^2) = 218519 \text{ [cal]}$$

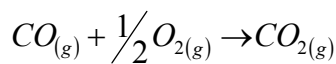
$$\Delta H_R = 1688 + (-217862) + 16,2 \times (-67636) + 218519 = 1093358 \text{ [cal]} = -1093 \text{ [Kcal]}$$

$$\Delta H_R = -4335 \left[\frac{\text{BTU}}{\text{Lb}} \right]$$



Problema N° 18: Calcular la temperatura de llama teórica del CO al quemarse a presión constante con 100 % de exceso de aire cuando los reactivos entran a 200° F.

Solución:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R^0 = [(-94,052)] - [(-26,416)] = -67,636 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Entrada)

CO: 1 [mol]

Aire (100 % exceso)

O_2 (teórico)= 1/2, O_2 (entrada)= $2 \times 1/2 = 1$ [moles]

$\text{N}_2 = 1 \times 79/21 = 3,76$ [moles]

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ \text{K}} \right] T [^\circ \text{K}]$
CO	1	$6,60 + 0,0012 \times T$
O ₂	1	$8,27 + 0,00015 \times T$
N ₂	3,76	$6,50 + 0,001 \times T$
Total		$39,31 + 6,46 \times 10^{-3} \times T$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = \int_{366}^{298} (39,31 + 6,46 \times 10^{-3} \times T) dT = \left| 39,31 \times T + \frac{6,46 \times 10^{-3}}{2} \times T^2 \right|_{366}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactantes}} = 39,31 \times (298 - 366) + \frac{6,46 \times 10^{-3}}{2} \times (298^2 - 366^2) = -2818 \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mol} \times ^\circ \text{K}} \right]$$

Salida)

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ \text{K}} \right] T [^\circ \text{K}]$
CO ₂	1	$10,34 + 0,00274 \times T$
O ₂	0,5	$8,27 + 0,00015 \times T$
N ₂	3,76	$6,50 + 0,001 \times T$
Total		$38,92 + 6,575 \times 10^{-3} \times T$

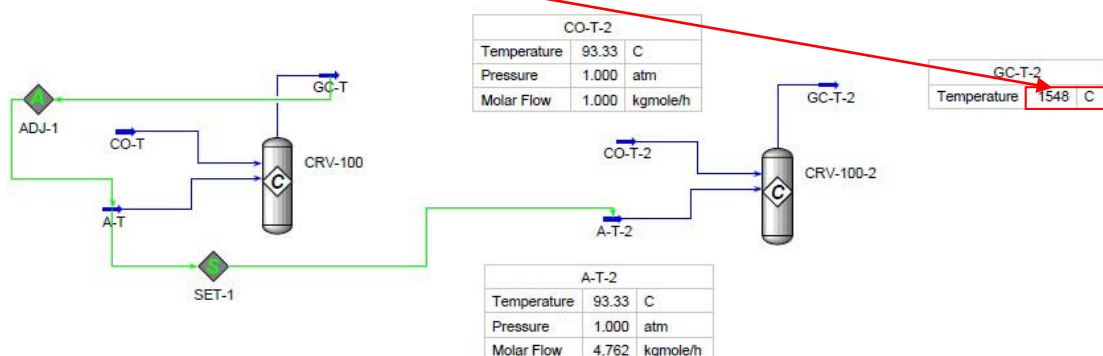
$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^T (38,92 + 6,575 \times 10^{-3} \times T) dT = \left| 38,92 \times T + \frac{6,575 \times 10^{-3}}{2} \times T^2 \right|_{298}^T$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 38,92 \times (T - 298) + \frac{6,575 \times 10^{-3}}{2} \times (T^2 - 298^2)$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 3,2875 \times 10^{-3} \times T^2 + 38,92 \times T - 11890$$

$$3,287 \times 10^{-3} \times T^2 + 38,92 \times T - 79526 = 0$$

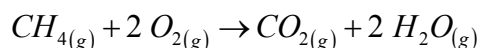
$$T = 1503 \text{ } ^\circ \text{C}$$



Problema N° 19: determinar con que sustancia se obtendrá la máxima temperatura de llama teórica, quemándose con un 100 % de exceso de aire y entrando el aire y los combustibles a 25° C al quemador:

- CH₄
- C₂H₆
- C₄H₁₀

Solución a:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

Como los reactantes entran a 25°C, el primer término, se anula.

El calor normal de reacción es:

$$\Delta H_R^0 = [(-94,052) + 2 \times (-57,7979)] - [(-17,829)] = -191,8 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Entrada)

Metano: 1 [mol]

Aire (100 % exceso)

O₂ (teórico)= 2, O₂ (entrada)= 2x2= 4 [moles]

N₂ = 4x79/21= 15 [moles]

Salida)

Comp	n	$Cp \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right]$	$T [^\circ K]$
CO ₂	1	10,34 + 0,00274 × T	
H ₂ O	2	8,22 + 0,00015 × T	
O ₂	2	8,27 + 0,000258 × T	
N ₂	15	6,50 + 0,00100 × T	
		140,82 + 0,01856 × T	

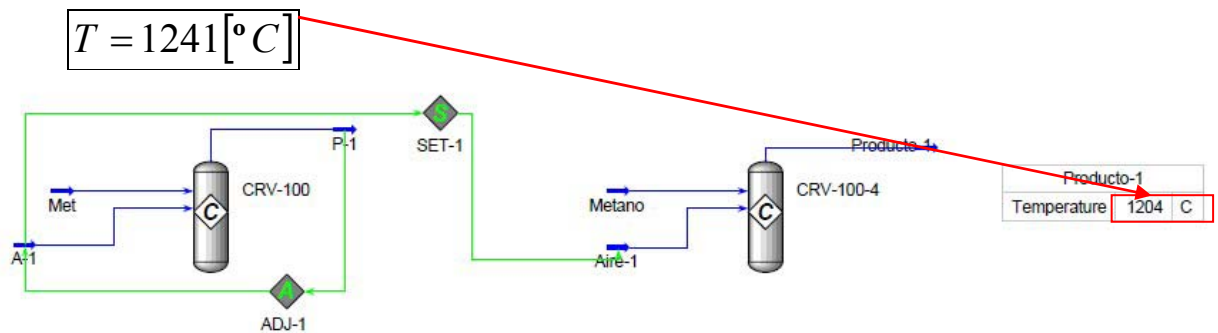
$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^T (140,82 + 0,01856 \times T) dT = \left| 140,82 \times T + \frac{0,01856}{2} \times T^2 \right|_{298}^T$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 140,82 \times (T - 298) + \frac{0,01856}{2} \times (T^2 - 298^2)$$

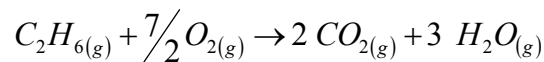
$$\Delta H_{\text{Producto}} = 9,28 \times 10^3 \times T^2 + 140,82 \times T - 47788$$

$$\Delta H_R = \Delta H_{R1}^0 + \Delta H_{R2}^0 + \Delta H_{\text{Productos}} = 0$$

$$9,28 \times 10^3 \times T^2 + 140,82 \times T - 234600 = 0$$



Solución b:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R^0 = [2 \times (-94,052) + 3 \times (-57,7979)] - [(-20,236)] = -341,3 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Entrada)

Etano: 1 [mol]

Aire (100 % exceso)

O₂ (teórico)= 3,5 (entrada)= 2x3,5= 7 [moles]

N₂ = 7x79/21= 26,3 [moles]

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right]$	$T [^\circ K]$
CO ₂	2	$10,34 + 0,00274 \times T$	
H ₂ O	3	$8,22 + 0,00015 \times T$	
O ₂	3,5	$8,27 + 0,000258 \times T$	
N ₂	26,3	$6,50 + 0,00100 \times T$	
		$245,2 + 0,03313 \times T$	

$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^T (245,2 + 0,03313 \times T) dT = \left| 245,2 \times T + \frac{0,03313}{2} \times T^2 \right|_{298}^T$$

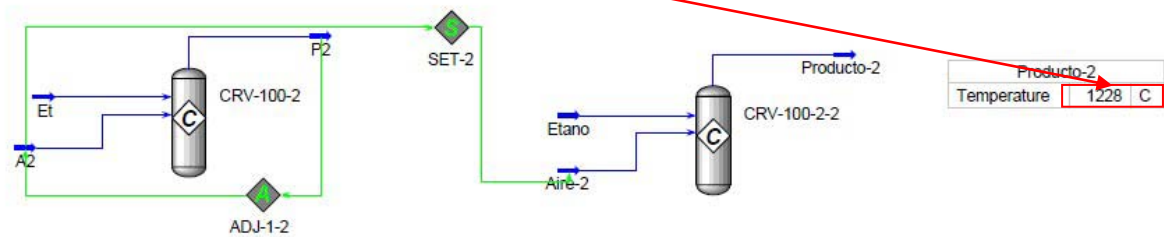
$$\Delta H_{\text{Producto}} = 245,2 \times (T - 298) + \frac{0,03313}{2} \times (T^2 - 298^2)$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 0,016565 \times T^2 + 245,2 \times T - 74540$$

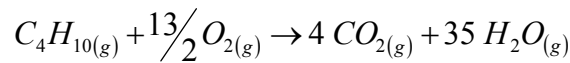
$$\Delta H_R = \Delta H_{R1}^0 + \Delta H_{R2}^0 + \Delta H_{\text{Productos}} = 0$$

$$0,016565 \times T^2 + 245,2 \times T - 415840 = 0$$

$$T = 1263^{\circ}\text{C}$$



Solución c:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R^0 = [4 \times (-94,052) + 5 \times (-57,7979)] - [(-29,812)] = -635,38 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

Entrada)

Butano: 1 [mol]

Aire (100 % exceso)

O₂ (teórico)= 6,5 (entrada)= 2x6,5= 13 [moles]

N₂=13x79/21= 48,9 [moles]

Comp	n	$C_p \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mol}^{\circ}\text{K}} \right]$	T[°K]
CO ₂	4	$10,34 + 0,00274 \times T$	
H ₂ O	5	$8,22 + 0,00015 \times T$	
O ₂	6,5	$8,27 + 0,000258 \times T$	
N ₂	48,9	$6,50 + 0,00100 \times T$	
		$454,06 + 0,06228 \times T$	

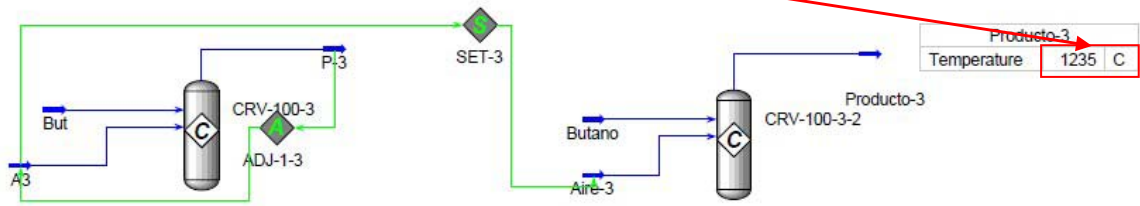
$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^T (454,06 + 0,06228 \times T) dT = \left| 454,06 \times T + \frac{0,06228}{2} \times T^2 \right|_{298}^T$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 454,06 \times (T - 298) + \frac{0,06228}{2} \times (T^2 - 298^2)$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 0,03114 \times T^2 + 454,06 \times T - 138075$$

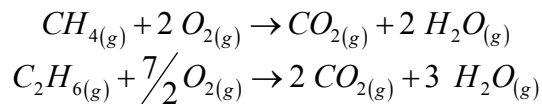
$$0,03114 \times T^2 + 454,06 \times T - 773455 = 0$$

$$T = 1267^{\circ} \text{C}$$



Problema N° 20: Una planta de energía eléctrica quema gas natural (de composición: CH_4 : 90 % y C_2H_6 : 10 %) a 77°F y 1 atm. de presión, con un 70 % de exceso de aire a las mismas condiciones. Determinar la máxima temperatura de la caldera si todos los productos se encuentran al estado gaseoso. Cuál sería la máxima temperatura si los reactantes se calientan previamente a 500°F .

Solución:



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_{R1}^0 + \Delta H_{R2}^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_{R1}^0 = 0,90 \times \{ [(-94,052) + 2 \times (-57,7979)] - [(-17,889)] \} = -172,6 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

$$\Delta H_{R2}^0 = 0,10 \times \{ [2 \times (-94,052) + 3 \times (-57,7979)] - [(-20,236)] \} = -34,12 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} \right]$$

$$\text{O}_2 \text{ (teórico)} = 0,9 \times 2 + 0,1 \times \frac{7}{2} = 2,15$$

$$\text{O}_2 \text{ (entrada)} = 1,7 \times 2,15 = 3,655$$

$$\text{O}_2 \text{ (salida)} = 3,655 - 2,15 = 1,505$$

$$21 (\text{O}_2) \rightarrow 79 (\text{N}_2)$$

$$3,655 (\text{O}_2) \rightarrow 13,75 (\text{N}_2)$$

Entrada)

Comp	n	$C_p [\text{Cal/mol}^{\circ} \text{K}]$	$T [^{\circ} \text{K}]$
CH_4	0,9	$5,34 + 0,0115 \times T$	
C_2H_6	0,1	$2,708 + 0,0292 \times T$	
O_2	3,655	$8,27 + 0,000258 \times T$	
N_2	13,75	$6,50 + 0,001 \times T$	
		$124,7 + 0,02796 \times T$	

$$\Delta H_{\text{Reactante}} = \int_{533}^{298} (124,7 + 0,02796 \times T) dT = \left| 124,7 \times T + \frac{0,02796}{2} \times T^2 \right|_{533}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactante}} = 124,7 \times (298 - 553) + \frac{0,02796}{2} \times (298^2 - 553^2) = -32034 \text{ [cal]}$$

Salida)

$$CO_2 = 0,9 \times 1 + 0,1 \times 2 = 1,1$$

$$H_2O = 0,9 \times 2 + 0,1 \times 3 = 2,1$$

Comp	n	Cp [Cal / mol ° K]	T [° K]
CO ₂	1,1	10,34 + 0,00274 × T	
H ₂ O	2,1	8,22 + 0,00015 × T	
O ₂	3,655	8,27 + 0,000258 × T	
N ₂	13,75	6,50 + 0,001 × T	
		130,5 + 0,01747 × T	

$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^T (130,5 + 0,01747 \times T) dT = \left| 130,5 \times T + \frac{0,01747}{2} \times T^2 \right|_{298}^T$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 130,5 \times (T - 298) + \frac{0,01747}{2} \times (T^2 - 298^2)$$

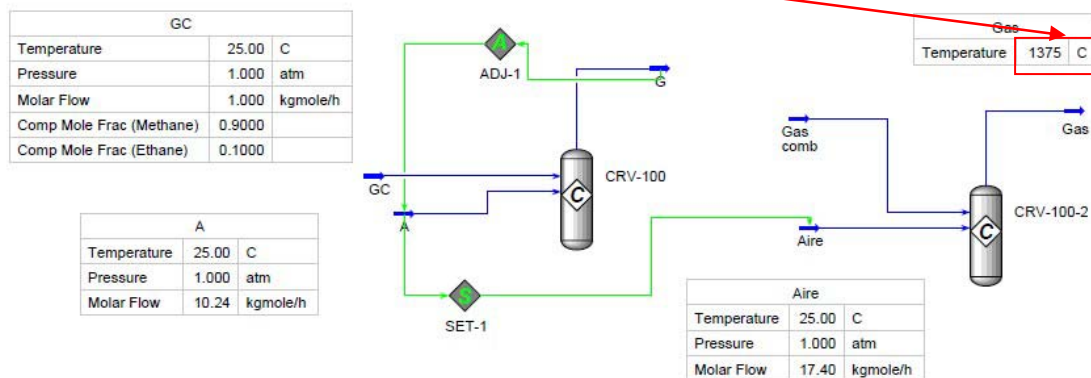
$$\Delta H_{\text{Producto}} = 8,735 \times 10^{-3} \times T^2 + 130,5 \times T - 39664$$

a) Entrada a 77°F (25 °C = 298 °K), ΔH_{REACTANTES}=0

$$\Delta H_R = -172600 - 34120 + 8,735 \times 10^{-3} \times T^2 + 130,5 \times T - 39996 = 0$$

$$\Delta H_R = 8,735 \times 10^{-3} \times T^2 + 130,5 \times T - 246716 = 0$$

$$T = 1424^\circ C$$



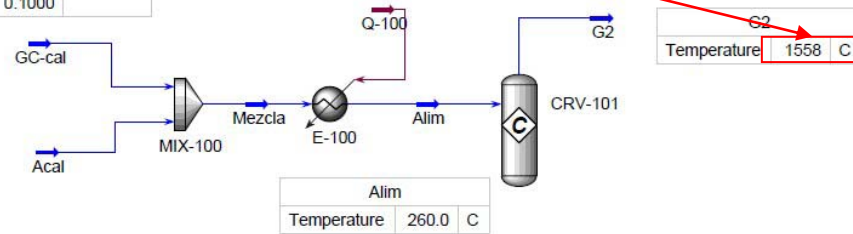
b) Entrada a 500 °F (260 °C = 533 °K)

$$\Delta H_R = -32034 - 172600 - 34120 + 8,735 \times 10^{-3} \times T^2 + 130,5 \times T - 39996 = 0$$

$$\Delta H_R = 8,735 \times 10^{-3} \times T^2 + 130,5 \times T - 278750 = 0$$

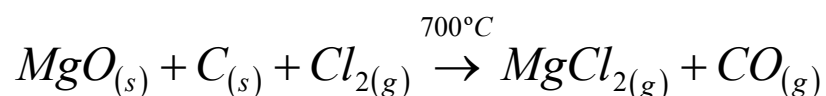
$$T = 1622 \text{ } ^\circ\text{C}$$

GC-cal		
Temperature	25.00	C
Molar Flow	1.000	kgmole/h
Comp Mole Frac (Methane)	0.9000	
Comp Mole Frac (Ethane)	0.1000	



Problemas adicionales:

Problema N° 21: Determinar el calor de reacción de la siguiente reacción química.



Compuesto	ΔH°_F [Kcal/gmol]	Cp	
MgO _(s)	-143,84	$10,86 + 0,1197 \times 10^{-2} T$	[cal/gmol °K]
C _(s)	-	$2,673 - 0,2617 \times 10^{-2} T$	[cal/gmol °K]
Cl _{2(g)}	-	$8,301 + 0,3267 \times 10^{-2} T$	[cal/gmol °C]
MgCl _{2(g)}	-153,40	$17,3 + 0,377 \times 10^{-2} T$	[cal/gmol °K]
CO _(g)	-26,416	$6,890 + 0,1430 \times 10^{-2} T$	[cal/gmol °C]

Solución:

$$\Delta H_R = \Delta H_R + \Delta H_R^{\circ} + \Delta H_P$$

$$\Delta H_R = \int_{700}^{298} \Sigma C_{p_R} \times dt =$$

$$= \int_{973}^{298} (10,86 + 0,1197 \times 10^{-2} \times T) dT +$$

$$\int_{973}^{298} (2,673 - 0,261 \times 10^{-2} \times T) dT +$$

$$\int_{700}^{25} (8,031 + 0,3267 \times 10^{-2} \times t) dt = -14,745 [kcal]$$

$$\Delta H_R^{\circ} = [(-153,40) + (-26,416)] - [(-143,84)] = 35,976 [Kcal]$$

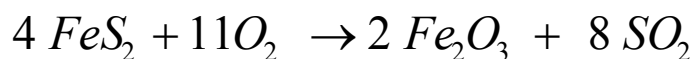
$$\Delta H_P = \int_{25}^{700} \Sigma C_{p_P} \times dt =$$

$$= \int_{298}^{973} (17,3 + 0,377 \times 10^{-2} \times T) dT +$$

$$\int_{25}^{700} (6,890 + 0,1436 \times 10^{-2} \times t) dt = 18,297 [Kcal]$$

$$\Delta H_R = -14,745 - 35,976 + 18,297 = -32,424 [Kcal]$$

Problema N° 22: La pirita se convierte en SO₂ mediante la reacción: _



A una temperatura de 400 °C. A causa de la operación inadecuada del quemador quedan masas de FeS₂ sin quemarse. Asimismo, debido a factores de equilibrio y de velocidad de reacción, esta es incompleta. Si se queman 2,5 Tn de pirita con 20 % de exceso de aire (basada en la reacción completa) y se produce 1 Tn de Fe₂O₃, calcular el calor de reacción a 400 °C.

Datos:

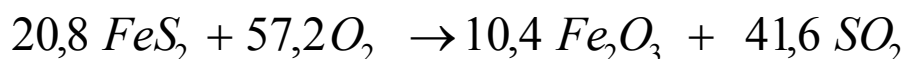
Especie	PM	ΔH _F : Kcal/molg	Cp	Unidades
FeS ₂	119,975	-42,52	10,7+1,336x10 ⁻² xT	Cal/ molg °K
O ₂	32	0	7,129+0,1407x10 ⁻² xt	Cal/ molg °C
Fe ₂ O ₃	159,7	-196,5	24,72+1,604x10 ⁻² xT	Cal/ molg °K
SO ₂	64	-70,96	9,299+0,933x10 ⁻² xt	Cal/ molg °C

Solución:

Nº de moles:
$$\text{FeS}_2 = \frac{2500}{119,975} = 20,8 \text{ kmol}$$

$$\text{Fe}_2\text{O}_3 = \frac{1000}{159,7} = 6,26 \text{ kmol}$$

Reacción total:
$$\frac{20,8}{4} (4 \text{FeS}_2 + 11\text{O}_2 \rightarrow 2 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 8 \text{SO}_2)$$



Oxígeno teórico: 57,2 kmoles

Oxígeno exceso: 11,44 kmoles

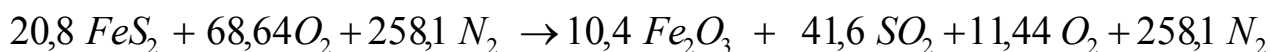
Total 68,64 kmoles

Nitrógeno teórico: 215,2 kmoles

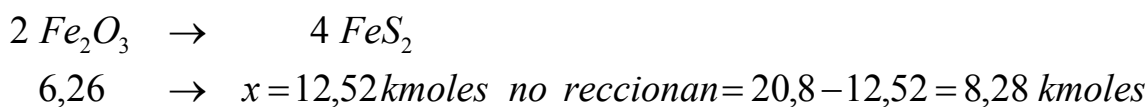
Nitrógeno exceso: 42,9 kmoles

Total 258,1 kmoles

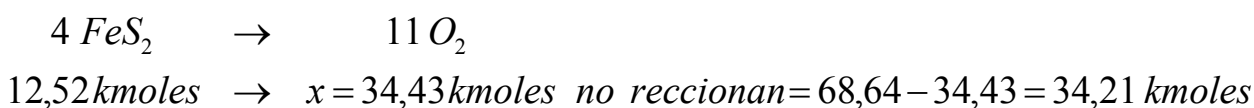
Reacción teórica



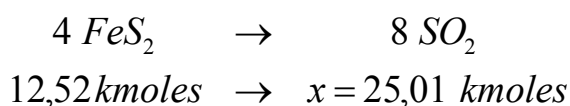
Reacción real: se obtiene realmente 6,26 kmol de Fe_2O_3 , por lo que reaccionan:



El nº de kmol de O_2 para la reacción será:



Se obtiene de SO_2 :



Reacción real:

	Reactantes	Productos
FeS_2	20,80	8,28
O_2	68,64	34,21
N_2	258,10	258,10
Fe_2O_3		6,26
SO_2		25,04

$$\Delta H_R^{400} = \Delta H_R + \Delta H_P + \Delta H_R^0$$

$$-|\Delta H_R| = \left[20,8 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{FeS}_2}} dt + 68,64 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{O}_2}} dt + 258,1 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{N}_2}} dt \right] \times 10^3$$

$$|\Delta H_P| = \left[6,26 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{Fe}_2\text{O}_3}} dt + 25,04 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{SO}_2}} dt + 258,1 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{N}_2}} dt + 34,21 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{O}_2}} dt + 8,28 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{FeS}_2}} dt \right] \times 10^3$$

$$|\Delta H_P| - |\Delta H_R| = \left[-12,52 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{FeS}_2}} dt - 34,43 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{O}_2}} dt + 25,04 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{SO}_2}} dt + 6,26 \int_{25}^{400} C_{p_{\text{Fe}_2\text{O}_3}} dt \right] \times 10^3$$

$$\begin{aligned}
-12,52 CP_{FeS_2} &= -179,662 - 16,727 \times 10^{-2} t \\
-34,43 CP_{O_2} &= -245,45 - 4,844 \times 10^{-2} t \\
25,04 CP_{SO_2} &= 232,85 + 23,362 \times 10^{-2} t \\
6,26 CP_{Fe_2O_3} &= 182,17 + 10,041 \times 10^{-2} t \\
\hline
&= -10,092 + 11,832 \times 10^{-2} t
\end{aligned}$$

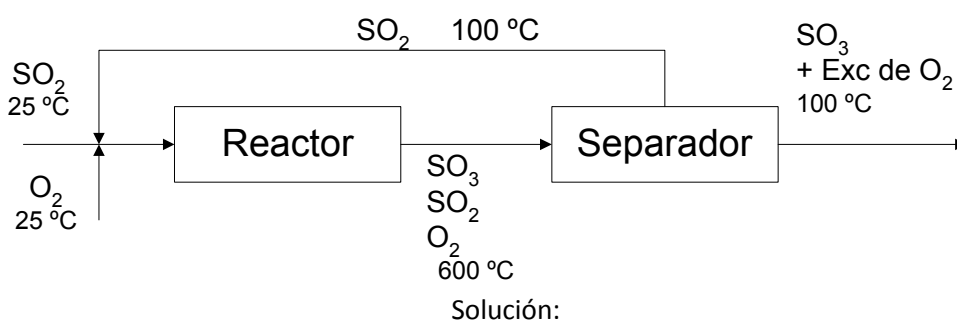
$$|\Delta H_P| - |\Delta H_R| = \left[\int_{25}^{400} (-10,092 + 11,832 \times 10^{-2} t) dt \right] = -10,092(400 - 25) + \frac{11,832 \times 10^{-2}}{2} (400^2 - 25^2) = 5,644 \times 10^3 \text{ Kcal}$$

$$\Delta H_R^0 = 6,26 \times 10^3 \{ [(-196,5) + 4(-70,96)] - [2((-42,52) + 5,5(0))] \} = -2,474 \times 10^3 \text{ Kcal}$$

$$\Delta H_R^{400} = -2,474 \times 10^3 \text{ Kcal} + 5,644 \times 10^3 \text{ Kcal} = -2,468 \times 10^3 \text{ Kcal}$$

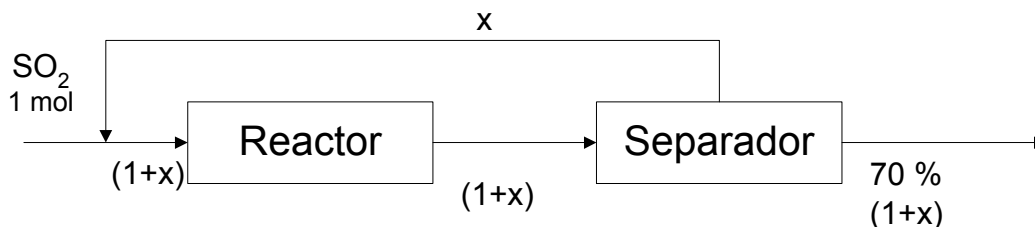
Problema N° 23: El reactor de una planta de oxidación catalítica de SO_2 a SO_3 tiene una conversión del 70 %. Cuando se alimenta SO_2 puro y 100 % de exceso de O_2 para realizar el total de la reacción. Los productos salen del reactor a 600 °C y se envían luego a un equipo que separa el SO_2 residual, que se recicla al reactor. Esta corriente tiene una temperatura de 100 °C y la del SO_2 fresca, como la del O_2 25 °C.

Calcular las calorías a entregar o extraer al reactor por mol de SO_2 fresco, para mantener la reacción en esas condiciones.



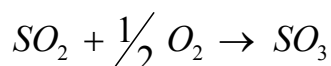
a) Cálculo del reciclo

Base= 1 mol de SO_2 de alimentación fresca (antes del punto de mezcla).



$$0,30 (1+x) = x \quad \therefore \quad 0,30 + 0,30x = x \quad x = 0,43$$

b) Reacción



- c) Entradas y salidas del reactor (asumimos que el exceso de O₂ es en base a la alimentación al reactor y no al proceso):

$$\begin{array}{l} \text{ENTRADAS} \left\{ \begin{array}{l} 1,43 \text{ moles de SO}_2 \\ 1,43 \text{ moles de O}_2 \text{ (25 } ^\circ\text{C)} \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ mol a } 25 ^\circ\text{C} \\ 0,43 \text{ mol a } 100 ^\circ\text{C} \end{array} \right. \\ \\ \text{SALIDAS} \left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ mol de SO}_3 \\ 0,43 \text{ moles de SO}_2 \\ 0,93 \text{ moles de O}_2 \end{array} \right. \end{array}$$

- d) Datos

Componente	Cp [cal/ gmol °C]	ΔH_R° [Kcal/gmol]
O ₂	7,129+0,0014 t	
SO ₂	9,299+0,0073 t	-70,960
SO ₃	11,591+0,02196 t	-94,450

- e) Cálculo del calor de reacción estándar:

$$\Delta H_R^0 = \Delta H_{f_{SO_3}}^0 - \Delta H_{f_{SO_2}}^0 = -94,450 + 70,960 = -23,490 \text{ [Kcal / gmol]}$$

- f) Enfriamiento de los reactivos hasta 25 °C
Solamente hay que enfriar el SO₂ desde 100 °C hasta 25 °C

$$\Delta H_R = 0,43 \times \int_{100}^{25} (9,299 + 0,0073 t) dt = 0,43 \times \left[9,299 t + \frac{0,0073 t^2}{2} \right]_{100}^{25}$$

$$\Delta H_R = 0,43 \times \left(9,299 \times (25 - 100) + \frac{0,0073}{2} (25^2 - 100^2) \right) = -0,314 \text{ [Kcal]}$$

- g) Calentamiento de los productos desde 25 °C hasta 600 °C
 ΣC_{Pi}

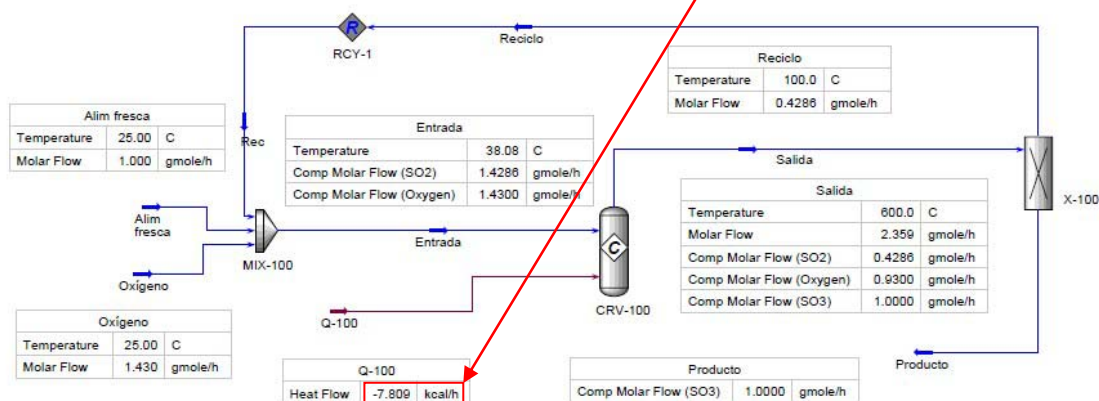
$$\begin{array}{l} 0,43(9,299 + 0,0093 t) \\ 1(11,591 + 0,02196 t) \\ 0,93(7,129 + 0,0014 t) \\ \hline 22,21954 + 0,027261 t \end{array}$$

$$\Delta H_P = \int_{25}^{600} (22,21954 + 0,027261 t) dt = 22,21954(600 - 25) + \frac{0,027261}{2} (600^2 - 25^2)$$

$$\Delta H_P = 12776,2 + 4,898 = 17675 [cal] = 17,675 [Kcal]$$

h) Calor de reacción=

$$\Delta H_R^{600} = -0,314 - 23,490 + 17,675 = -6,129 \left[\frac{Kcal}{gmol \text{ de } SO_2} \right]$$



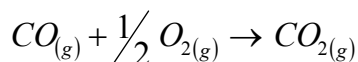
Problema N° 24: Si el CO a presión constante, se quema a presión constante, en presencia de un exceso de aire y la temperatura de llama adiabática es de 1000 °C. ¿Cuál es el porcentaje de exceso de aire utilizado? Los reactivos entran a 90 °C.

Datos:

Componente	ΔH^0_f [Kcal/mol]	C_p [cal/ mol °C]
CO	-26,416	$6,60 + 0,0012 T$
O ₂	-	$8,27 + 0,000258 T$
CO ₂	-94,052	$10,34 + 0,00274 T$
N ₂	-	$6,50 + 0,001 T$

Solución:

Base: 1 mol de CO.



$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R^0 = (-94,052) - (-26,416) = -67,636 [kcal]$$

El exceso de oxígeno se define como:

$$Exc = \frac{O_2^{Entra} - O_2^{Teorico}}{O_2^{Teorico}} \times 100 \rightarrow O_2^{Entra} = O_2^{Teorico} \times (1 + X)$$

Donde $X = \text{Exc}/100$:

El Nitrógeno que lo acompaña: $N_2^{\text{Entra}} = O_2^{\text{Entra}} \times \frac{79}{21} = O_2^{\text{Teorico}} \times (1 + X) \times \frac{79}{21}$

Entrada)

CO) 1 [mol] (Base de cálculo)

O₂) como el teórico es 0,5 [mol]

$$O_2^{\text{Entra}} = 0,5 \times (1 + X)$$

N₂) $N_2^{\text{Entra}} = 0,5 \times (1 + X) \times \frac{79}{21}$

Comp	n	$Cp \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
CO	1	$6,60 + 0,0012 \times T$
O ₂	$0,5 \times (1 + X)$	$8,27 + 0,000258 \times T$
N ₂	$0,5 \times (1 + X) \times \frac{79}{21}$	$6,50 + 0,001 \times T$
CO ₂	0	$10,34 + 0,00274 \times T$

$$a_E = 6,60 + 8,27 \times 0,5 \times (1 + X) + 6,5 \times 0,5 \times (1 + X) \times \frac{79}{21} = 6,60 + 4,135 + 4,135 \times X + 12,22 + 12,22 \times X$$

$$a_E = [22,955 + 16,355 \times X]$$

$$b_E = 0,0012 + 0,000258 \times 0,5 \times (1 + X) + 0,001 \times 0,5 \times (1 + X) \times \frac{79}{21}$$

$$b_E = 0,0012 + 1,29 \times 10^{-4} + 1,29 \times 10^{-4} \times X + 1,88 \times 10^{-3} + 1,88 \times 10^{-3} \times X$$

$$b_E = [3,209 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X]$$

$$Cp_E = [22,955 + 16,355 \times X] + [3,209 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X] \times T$$

Salida)

CO₂: 1 [mol] (conversion total)

O₂: entrada – reacción teórica (0,5 [mol])

$$O_2^{\text{Sale}} = 0,5 \times (1 + X) - 0,5 = 0,5 + 0,5 \times X - 0,5 = 0,5 \times X$$

N₂: entrada=salida

<i>Comp</i>	<i>n</i>	$Cp \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K} \right] T [^\circ K]$
<i>CO</i>	0	$6,60 + 0,0012 \times T$
<i>O₂</i>	$0,5 \times X$	$8,27 + 0,000258 \times T$
<i>N₂</i>	$0,5 \times (1 + X) \times \frac{79}{21}$	$6,50 + 0,001 \times T$
<i>CO₂</i>	1	$10,34 + 0,00274 \times T$

$$a_s = 10,34 + 8,27 \times 0,5 \times X + 6,5 \times 0,5 \times (1 + X) \times \frac{79}{21} = 10,34 + 4,135 \times X + 12,22 + 12,22 \times X$$

$$a_s = [22,566 + 16,355 \times X]$$

$$b_s = 0,00274 + 0,000258 \times 0,5 \times X + 0,001 \times 0,5 \times (1 + X) \times \frac{79}{21}$$

$$b_s = 0,00274 + 1,29 \times 10^{-4} \times X + 1,88 \times 10^{-3} + 1,88 \times 10^{-3} \times X$$

$$b_s = [4,62 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X]$$

$$Cp_s = [22,566 + 16,355 \times X] + [4,62 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X] \times T$$

$$\Delta H_{\text{Reactante}} = \int_{363}^{298} \{ [22,955 + 16,355 \times X] + [3,209 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X] \times T \} dT$$

$$\Delta H_{\text{Reactante}} = \left| (22,955 + 16,355 \times X) \times T + \frac{(3,209 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X)}{2} \times T^2 \right|_{363}^{298}$$

$$\Delta H_{\text{Reactante}} = (22,955 + 16,355 \times X) \times (298 - 363) + \frac{(3,209 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X)}{2} \times (298^2 - 363^2)$$

$$\Delta H_{\text{Reactante}} = (22,955 + 16,355 \times X) \times (-65) + \frac{(3,209 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X)}{2} \times (-42965)$$

$$\Delta H_{\text{Reactante}} = -1492 - 1063 \times X - 68,9 - 43,2 \times X = -1561 - 1106 \times X$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = \int_{298}^{1273} \{ [22,566 + 16,355 \times X] + [4,62 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X] \times T \} dT$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = \left| (22,566 + 16,355 \times X) \times T + \frac{(4,62 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X)}{2} \times T^2 \right|_{298}^{1273}$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = (22,566 + 16,355 \times X) \times (1273 - 298) + \frac{(4,62 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X)}{2} \times (1273^2 - 298^2)$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = (22,566 + 16,355 \times X) \times (975) + \frac{(4,62 \times 10^{-3} + 2,009 \times 10^{-3} \times X)}{2} \times (1,532 \times 10^6)$$

$$\Delta H_{\text{Producto}} = 22001 + 15946 \times X + 3538 + 1538 \times X = 25539 + 17484 \times X$$

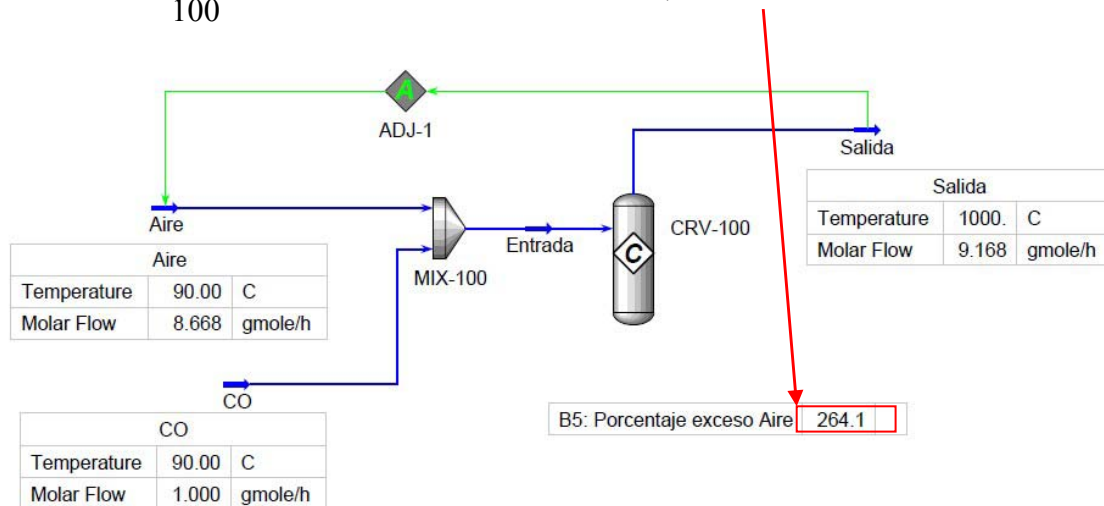
$$\Delta H_R = \Delta H_{\text{Reactantes}} + \Delta H_R^0 + \Delta H_{\text{Productos}}$$

$$\Delta H_R = -1561 - 1106 \times X - 67636 + 25539 + 17484 \times X = 0$$

$$16378 \times X = 43658$$

$$X = \frac{43658}{16378} = 2,66$$

Como: $X = \frac{\text{Exceso}}{100} \rightarrow \text{Exceso} = 100 \times X = 100 \times 2,66 = 266 \% \text{ Exceso}$



Símbolos del capítulo:

Letras Latinas	Descripción
P	Presión
N	moles
V	Volumen
R	Constante de los gases
T	Temperatura absoluta
T	Temperatura en °C
PM	Peso molecular

ΔH	Entalpía (siempre relativa a un estado de referencia)
C_p	Capacidad calorífica a presión constante
N	moles
Q	Calor
X	Fracción molar (fase líquida)
ΔU	Energía Interna (siempre relativa a un estado de referencia)
N_C	Número de componentes
ΔS	Variación de Entropía
ΔG	Variación de la energía libre de Gibbs

Subíndices	Descripción
------------	-------------

G	Gas
T	Total
F	de formación
1, 2, ...	Estado 1, Estado2 ,..
R	de reacción

Letras griegas	Descripción
----------------	-------------

Δ	Variación discreta
N	Coeficiente estequiométrico
A	coeficiente de dilatación isobárica

Especiales	Descripción
------------	-------------

$\overline{P}$	Propiedad "P" específica
----------------	--------------------------