

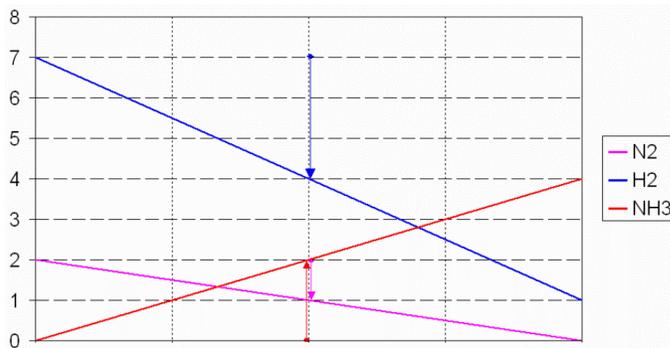
Por ejemplo, considere el cambio en el número de moles para la reacción $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$ si inicialmente se tienen 7 moles de H_2 , 2 moles de N_2 y 0 moles de NH_3 . Pasado cierto tiempo, habrán reaccionado 1 mol de N_2 , 3 moles de H_2 y se habrán producido 2 moles de NH_3 . Si se dividen las moles producidas / reaccionadas por los coeficientes estequiométricos, se tiene:

$$\frac{R_{N_2}}{\nu_{N_2}} = \frac{-1}{-1} \quad \frac{R_{H_2}}{\nu_{H_2}} = \frac{-3}{-3} \quad \frac{R_{NH_3}}{\nu_{NH_3}} = \frac{2}{2}$$

Todas las tres relaciones son iguales a 1, si se hacen los cálculos cuando reaccionan 1.5 moles de N_2 , se tiene:

$$\frac{R_{N_2}}{\nu_{N_2}} = \frac{-1.5}{-1} \quad \frac{R_{H_2}}{\nu_{H_2}} = \frac{-4.5}{-3} \quad \frac{R_{NH_3}}{\nu_{NH_3}} = \frac{3}{2}$$

En este caso, todas las relaciones son 1.5, indicando un **avance** en la reacción. A esta relación se le llama **Coordenada o Avance de Reacción**, y se simboliza por ϵ .



El eje x en la gráfica, entonces corresponde a ϵ . El avance de las reacciones tiene tres limitantes: alcanzar el estado de equilibrio, el agotamiento de uno de los reactivos, o la permanencia insuficiente de tiempo en el reactor (lugar con condiciones de T, P, pH, adecuadas). Todas estas tres pueden representarse en el diagrama, y calcularse en términos de ϵ . (Representarlas)

Los problemas típicos de ingeniería química consideran el caso en que la permanencia en el reactor detiene la reacción antes de alcanzar el equilibrio, o por el agotamiento de los reactivos. Para el cálculo de balances de materia se consideran flujos de componentes, introduciendo la variable tiempo a la misma definición de ϵ .

$$\epsilon = \frac{R_{N_2}}{\nu_{N_2}} = \frac{F_{N_2}^{Sal} - F_{N_2}^{Ent}}{\nu_{N_2}} \quad \text{Donde F son los flujos de salida y entrada de componentes al reactor.}$$

Ejemplo: A un reactor se alimentan 12, 40, y 0 moles/h de N_2 , H_2 y NH_3 . A la salida del reactor se obtienen 8 mol/h de NH_3 , calcular los flujos de reactivos que salen con el NH_3 .

De la definición de ϵ , se tiene:

$$\epsilon = \frac{F_{NH_3}^{Sal} - F_{NH_3}^{Ent}}{\nu_{NH_3}} = \frac{8 - 0}{2} = 4 \frac{mol}{h}$$

Para el N_2 y el H_2 , se tiene:

$$F_{N_2}^{Sal} = \epsilon \nu_{N_2} + F_{N_2}^{Ent} = 4(-1) + 12 = 8 \text{ mol } N_2 / h \quad F_{H_2}^{Sal} = \epsilon \nu_{H_2} + F_{H_2}^{Ent} = 4(-3) + 40 = 28 \text{ mol } H_2 / h$$

Cuando uno de los reactivos se agota, la reacción se detiene, a éste se le llama el *reactivo limitante*.

Conversión

La conversión es la fracción que se consume de uno de los reactivos:

$$X_s = \frac{F_s^{Ent} - F_s^{Sal}}{F_s^{Ent}} \quad \text{Normalmente este es una especificación en los problemas de diseño.}$$

En términos de la coordenada de reacción, se tiene:

$$\varepsilon = \frac{F_s^{Sal} - F_s^{Ent}}{v_s} = \frac{-F_s^{Ent} X_s}{v_s} \quad \text{Si se especifica una conversión, se puede calcular } \varepsilon.$$

Reacciones Múltiples

Para un sistema con S componentes y R reacciones, se establece una coordenada de reacción ε_r por cada reacción, de acuerdo con:

$$\varepsilon_r = \frac{R_{sr}}{v_{sr}} \quad \text{Donde } R_{sr} \text{ representa las moles del componente } s \text{ que intervienen en la reacción } r \text{ y } v_{sr} \text{ su coeficiente estequiométrico.}$$

La intervención neta del componente s en todas las reacciones, será:

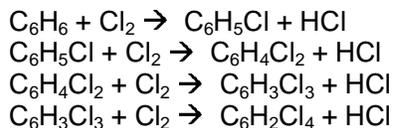
$$R_s = \sum_{r=1}^R \varepsilon_r v_{sr}$$

Como este el cambio global del componente s, se tendrá que:

$$F_s^{Sal} = F_s^{Ent} + \sum_{r=1}^R \varepsilon_r v_{sr}$$

Ejemplo:

La cloración de benceno produce una mezcla de productos clorados, de acuerdo con:



Se produce mayormente triclorobenceno de acuerdo con:

C_6H_6	1%
$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	7%
$\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$	12%
$\text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3$	75%
$\text{C}_6\text{H}_2\text{Cl}_4$	5%

Si se cargan al reactor 1000 moles/h de benceno, calcular los flujos de componentes.