

## PEC del Bloque 2

### Actividad 2.2

#### Enunciado

Realizar el balance de materia para el proceso completo, y la estimación de los requerimientos energéticos relacionados con el calor a eliminar de cada reactor de cloración para mantener la temperatura del mismo constante, teniendo en cuenta la descripción del proyecto propuesto en el apéndice F.2 de la bibliografía básica “**Clorobencenos a partir benceno y cloro**” (página 1177).

Los cálculos de diseño se realizarán para una planta preparada para producir **20000 toneladas métricas/año de monoclorobenceno** junto con **no menos de 1500 toneladas métricas/año de diclorobenceno**, por cloración directa del benceno.

Incorporar los resultados obtenidos en el diagrama de bloques dibujado en la Actividad 2.1.

#### Instrucciones

A continuación, se detallan las instrucciones para la realización del balance de materia del proceso completo y la estimación de los requerimientos energéticos de los reactores.

#### BALANCES DE MATERIA

En primer lugar, hay que tener en cuenta que ambos reactores se consideran de mezcla total y que tienen dos corrientes de entrada de reactantes, una entrada para fase líquida (benceno) y una entrada la fase gas ( $\text{Cl}_2$ ). La salida de la fase líquida del primer reactor constituye la entrada al segundo, por lo que contendrá productos de cloración además de benceno. Además, ambos reactores también tienen dos corrientes de salida, una salida de fase líquida y una salida de fase gas. Las corrientes de salida en fase gas contienen, además de  $\text{Cl}_2$  y  $\text{HCl}$ , una fracción de los productos orgánicos que resta rendimiento al proceso.

Si se elige, por simplicidad, como base de cálculo **un mol de benceno de entrada** y se tiene en cuenta que la cantidad de cloro introducida es menor que la estequiométrica, porque se trabaja a bajas conversiones y es deseable minimizar el consumo de cloro (tanto para reducir el arrastre de productos orgánicos en las corrientes de salida gaseosas como por motivos económicos) es posible averiguar, con los datos que se dispone, la cantidad de cada producto en la salida de la fase líquida del segundo reactor, lo que a su vez permite estimar la alimentación de benceno necesaria para obtener la producción indicada.

Datos a considerar en la resolución de los balances de los reactores de cloración:

- Temperatura de referencia 298 K
- Temperatura en cada reactor 328K
- Presión 2.3 bar
- Tiempo hidráulico en cada reactor ( $V/Q$ ) 2670s

- Conversión total de benceno (B) en cada reactor.
- Selectividad a monoclorobenceno (MCB) y selectividad a diclorobenceno (DCB) en cada reactor (como % de benceno transformado en estos reactivos).
- Distribución de cada compuesto en las fases gas-líquido de cada reactor, expresado como la relación entre la fracción molar en el gas y la suma de fracciones molares de ambas fases para cada compuesto.:  $y/(x+y)$

*Primer reactor.*

- Conversión: 19.4%
- Relación de corrientes de entrada al primer reactor:  $E_{Cl_{R1}}/E_{B_{R1}} = 0.240$

**Tabla 2.2.1**

Datos del primer reactor.

Reactivos	Selectividad %	$y/(x+y)$
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		0.0434
Cl <sub>2</sub>		1.0000
HCl		0.8507
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Cl	96.2	0.0078
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	3.8	0.0014

*Segundo reactor.*

- Conversión: 21.1%
- Relación de corrientes de entrada al primer reactor:  $E_{Cl_{R2}}/E_{B_{R2}} = 0.311$

**Tabla 2.2.2**

Datos del segundo reactor.

Reactivos	Selectividad %	$y/(x+y)$
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		0.0451
Cl <sub>2</sub>		1.0000
HCl		0.8230
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Cl	92.2	0.0075
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	7.8	0.0016

En las tablas 2.2.3 y 2.2.4 se deben introducir los resultados (en kmol/h) obtenidos de los balances de materia para los dos reactores y los resultados obtenidos de los balances de materia relacionados con las destilaciones descritas en el proyecto, de acuerdo con la producción de **2·10<sup>7</sup> kg/año de MCB** con una pureza del 99.7 por ciento en peso y de al menos **1.5·10<sup>6</sup> kg/año de DCB** con una pureza del 99.6 por ciento en peso.

**Tabla 2.2.3**

Datos de la corriente de alimentación de benceno al proceso (AB) y de las corrientes de entrada ( $EB_{Ri}$  y  $ECl_{Ri}$ ) y salida ( $SG_{Ri}$  y  $SL_{Ri}$ ) del sistema de reacción formado por los reactores, R1 y R2 (kmol/h).

	Alimentación	Primer Reactor (R1)				Segundo Reactor (R2)			
Reactivos	AB	$EB_{R1}$	$ECl_{R1}$	$SG_{R1}$	$SL_{R1}$	$EB_{R2}$	$ECl_{R2}$	$SG_{R2}$	$SL_{R2}$
Benceno									
Cl <sub>2</sub>									
HCl									
MCB									
DCB									
Total									

**Tabla 2.2.4**

Datos las corrientes (kmol/h) de alimentación (F), destilado (D) y fondos (B) de los sistemas de destilación.

	DES1			DES2		
Reactivos	F <sub>1</sub>	D <sub>1</sub>	B <sub>1</sub>	F <sub>2</sub>	D <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>
Benceno						
Cl <sub>2</sub>						
HCl						
MCB						
DCB						
Total						

## REQUERIMIENTOS ENERGÉTICOS DE LOS REACTORES

Respecto a los **requerimientos energéticos** hay que calcular el calor retirado en cada uno de los reactores para mantener la temperatura constante a 328K, a partir de los valores obtenidos de los balances de materia para las diferentes corrientes.

### *Primer reactor*

Se propone como método de cálculo suponer que la reacción transcurre a 298K, temperatura de entrada de ambas corrientes y el calor desprendido eleva la temperatura a 328K, el exceso de calor se debe eliminar.

Datos:

Temperatura de referencia = 298K

Calor a eliminar ( $Q_{R1}$ ) =  $\sum(\Delta\text{Entalpías de reacción a 298 K}) - \sum(\Delta\text{Entalpía para llevar a las corrientes de salida desde 298K a 328K})$

$$Q_{R1} \text{ (W)} = \sum(\Delta H_{R, 298 \text{ K}})_{R1} - \sum(\Delta H_{298 \text{ K a } 328 \text{ K}})_{R1}$$

Cálculos que realizar:

- Calor de reacción:  $\sum(\Delta H_{R, 298 \text{ K}})_{R1}$ 
  - o  $\Delta\text{Entalpía de reacción de benceno a monoclorobenceno en el primer reactor a 298K. } (\Delta H_{R,B \rightarrow M, 298 \text{ K}})_{R1}$
  - o  $\Delta\text{Entalpía de reacción monoclorobenceno a diclorobeneno en el primer reactor a 298K. } (\Delta H_{R,M \rightarrow D, 298 \text{ K}})_{R1}$
- Entalpía de las corrientes de salida:  $\sum(\Delta H_{298 \text{ K a } 328 \text{ K}})_{R1}$ 
  - o Corriente  $SL_{R1}$ , calcular  $\Delta\text{Entalpía para llevar a B, MCB, DCB y HCl de 298 a 328K. } (\Delta H_{298 \text{ K a } 328 \text{ K}})_{SLR1}$
  - o Corriente  $SG_{R1}$ , calcular:
    - o  $\Delta\text{Entalpía para llevar los gases HCl y Cl}_2 \text{ de 298 a 328 K. } (\Delta H_{298 \text{ K a } 328 \text{ K}})_{SGR1}$
    - o  $\Delta\text{Entalpía para vaporizar B, MCB y DCB, (se acepta, para simplificar, el calor de vaporización a la temperatura de vaporización de cada componente). } (\Delta H_{\text{vapB}})_{R1}, (\Delta H_{\text{vapM}})_{R1}, \text{ y } (\Delta H_{\text{vapD}})_{R1}$

### *Segundo reactor.*

Se plantea como método de cálculo suponer que la reacción transcurre a 298K, temperatura de entrada de la corriente gaseosa ( $Cl_2$ ), y el calor desprendido eleva la temperatura a 328K, el exceso de calor se debe eliminar, teniendo en cuenta que ha habido un aporte de calor por parte de la corriente de entrada líquida,  $EB_{R2} = SL_{R1}$ , que procede del primer reactor y por tanto entra a 328K.

Datos:

Temperatura de referencia 298 K

Calor a eliminar ( $Q_{R2}$ ) =  $\Delta(\text{Entalpía de reacción a 298 K}) + \Delta(\text{Entalpía de la corriente de entrada } EB_{R2} = SL_{R1}) - \Delta(\text{Entalpía para llevar a las corrientes de salida desde 298K a 328K})$

$$Q_{R2} \text{ (kW)} = \sum(\Delta H_{R \text{ 298 K}})_{R2} + (\Delta H_{298K \text{ a } 328K})_{SLR1} - \sum(\Delta H_{298K \text{ a } 328K})_{R2}$$

Cálculos a realizar:

- Calor de reacción:  $\sum(\Delta H_{R \text{ 298 K}})_{R2}$ 
  - o  $\Delta$ Entalpía de reacción de benceno a monoclorobenceno en el primer reactor a 298K.  $(\Delta H_{R,B \rightarrow M \text{ 298 K}})_{R2}$
  - o  $\Delta$ Entalpía de reacción monoclorobenceno a diclorobeneno en el primer reactor a 298K.  $(\Delta H_{R,M \rightarrow D \text{ 298 K}})_{R2}$
- Entalpía de las corrientes de salida:  $\sum(\Delta H_{298K \text{ a } 328K})_{R2}$ 
  - o Corriente  $SL_{R2}$ , calcular  $\Delta$ Entalpía para llevar a B, MCB, DCB y HCl de 298 a 328K.  $(\Delta H_{298K \text{ a } 328K})_{SLR2}$
  - o Corriente  $SG_{R2}$ , calcular:  $(\Delta H_{298K \text{ a } 328K})_{SGR2}$ 
    - o  $\Delta$ Entalpía para llevar los gases HCl y Cl<sub>2</sub> de 298 a 328 K.  $\sum(C_p \Delta T)_{SGR2}$
    - o  $\Delta$ Entalpía para vaporizar B, MCB y DCB, (se acepta, para simplificar, el calor de vaporización a la temperatura de vaporización de cada componente).  $(\Delta H_{vapB})_{R2}$ ,  $(\Delta H_{vapM})_{R2}$ , y  $(\Delta H_{vapD})_{R2}$

Se pueden utilizar como datos los que se dan en la Tabla 2.2.5.

En la tabla 2.2.6 se deben introducir los resultados (en kW) obtenidos de los balances de energía para los dos reactores.

El documento con la resolución de la actividad 2.2 se incorporará al curso virtual, y debe incluir las tablas 2.2.3, 2.2.4 y 2.2.6 completadas, junto con un resumen de los cálculos realizados, en un archivo de texto (tipo “word” o “pdf”). Todo ello se introducirá en el **diagrama de bloques**, y en tablas como se presenta en los diagramas ejemplo del texto base.

**Tabla 2.2.5**

Calores de reacción, calores de vaporización y calores específicos de los compuestos en fase líquida y fase vapor.

	Fase líquida			Fase vapor			Calor vaporización (T <sub>b</sub> ) kJ/mol	Calor reacción 298 K kJ/mol
	Cp liquido 298 K J/mol/K	Cp liquido 328 K J/mol K	Cp Medio	Cp vapor 298 K J/mol K	Cp vapor 328 K J/mol K	Cp Medio		
B	136	142	139	82	91.914	87	30.781	
M	152	157	154.5	92	101.25	51.6	36.572	-133.86
D	159.2	177	168	103	111.67	107.3	38.812	-141.86
HCl		63.8		29.15	29.13	29.14		
Cl <sub>2</sub>		69.8		33.26	34.41	33.8		
H <sub>2</sub> O		75.3						

**Tabla 2.2.6**

Requerimientos energéticos de los reactores de cloración de benceno.

Entalpías (kW)	Primer Reactor	Segundo Reactor
$(\Delta H_{R,B \rightarrow M} 298 K)_{Ri}$		
$(\Delta H_{R,M \rightarrow D} 298 K)_{Ri}$		
$\sum(\Delta H_{R} 298 K)_{Ri}$		
$(\Delta H_{298K \text{ a } 328K})_{SLRi}$		
$(\Delta H_{298K \text{ a } 328K})_{SGRi}$		
$\sum(\Delta H_{298K \text{ a } 328K})_{Ri}$		
Q <sub>Ri</sub>		