

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 retirar o aportar en los reactores de hidroformilación y craqueo, necesario para mantener la temperatura de los mismos constante, en el proyecto propuesto en el apéndice F.1 de la bibliografía básica “**Etilhexanol a partir de Propileno y de Gas de Síntesis**” (página 1173).

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

Instrucciones

Para la resolución de esta actividad se recomienda la consulta de los capítulos 2 y 3, y de los ejemplos ilustrados en las figuras 4.1, 4.2, 4.2A y 4.3 del capítulo 4 del texto base (“Diseño en Ingeniería Química”), y del Tema 1 de la Unidad Didáctica de la asignatura Operaciones Unitarias y Reactores Químicos, de 3º del Grado en Química de la UNED.

A continuación se detallan las instrucciones para la realización de los balances másicos y la estimación de los requerimientos energéticos.

BALANCES MÁSICOS

En las tablas 2.2.1, 2.2.2 y 2.2.3 se deben introducir los resultados obtenidos de los balances de materia para los diferentes reactores y los resultados obtenidos de los balances de materia relacionados con las operaciones de separación gas-líquido y las destilaciones descritas en el proyecto. Así, se han de incluir los datos para las corrientes asociadas al primer separador gas-líquido que trabaja a 30 bares (SGL1), al segundo separador gas-líquido a presión atmosférica (SGL2), al primer destilador utilizado para separar los isobutiraldehídos de los butanoles (DES1) y al segundo destilador utilizado para separar el n-butiraldehído del isobutiraldehído (DES2).

En las siguientes etapas hay que tener en cuenta algunas cuestiones adicionales a las descritas en el proyecto propuesto:

Reactor de hidroformilación

- Considerar que la relación molar 2:1 gas de síntesis:propileno se cumple para la relación molar H_2 :Propileno
- Suponer que el peso molecular de las fracciones pesadas es de 300 kg/kmol y proceden exclusivamente de propileno reaccionado.
- Suponer que la conversión del propileno hacia los butiraldehídos es del 95%, siendo la conversión a propano de un 3%.

Reactor de craqueo

- Considerar que el 80% de rendimiento supone una conversión del 80% tanto del isobutiraldehído como el n-butiraldehído introducidos en el reactor de craqueo.

Primer separador gas-líquido (SGL1)

- Para poder determinar las cantidades disueltas de compuestos más volátiles (propileno, propano, CO e H₂) de acuerdo a la tabla de solubilidades dada en la página 1175 del texto base, en este separador, es necesario conocer previamente las cantidades de aldehídos, alcoholes y fracciones pesadas producidas en el reactor de hidroformilación, en kg, de acuerdo a la cantidad prevista a producir de Etilhexanol según el proyecto propuesto.

Tabla 2.2.1

Datos de las corrientes (kmol/h) de alimentación al proceso (A), entrada (E_{HF}) y salida (S_{HF}) del reactor del Hidroformilación, y salida gaseosa (SG) y líquida (SL) de los separadores gas-líquido.

Reactivos	Hidroformilación			SGL1			SGL2		
	A	E _{HF}	S _{HF}	E _{SGL1}	SG _{SGL1}	SL _{SGL1}	E _{SGL2}	SG _{SGL2}	SL _{SGL2}
Propileno									
Propano									
CO									
H ₂									
CH ₄									
N ₂									
n-Butiraldehído									
Isobutiraldehído									
n-Butanol									
Isobutanol									
Fracc. pesadas									
2-Etilhexanal									
2-Etilhexanol									
Total									

Tabla 2.2.2

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











































Reactivos	DES1			DES2		
	F ₁	D ₁	B ₁	F ₂	D ₂	B ₂
Propileno						
Propano						
CO						
H ₂						
CH ₄						
N ₂						
n-Butiraldehído						
Isobutiraldehído						
n-Butanol						
Isobutanol						
Fracc. pesadas						
2-Etilhexanal						
2-Etilhexanol						
Total						

Tabla 2.2.3

Datos de las corrientes (kmol/h) de entrada al reactor (E), salida del reactor (S) y reciclado (R) en los reactores de Craqueo, Condensación Aldólica y Reducción.

Reactivos	Craqueo			Cond. Aldólica		Reducción	
	E _{CQ}	R _{CQ}	S _{CQ}	E _{CA}	S _{CA}	E _{Red}	S _{Red}
Propileno							
Propano							
CO							
H ₂							
CH ₄							
N ₂							
n-Butiraldehído							
Isobutiraldehído							
n-Butanol							
Isobutanol							
Fracc. pesadas							
2-Etilhexanal							
2-Etilhexanol							
Total							

REQUERIMIENTOS ENERGÉTICOS

Respecto a los **requerimientos energéticos** hay que calcular el calor a retirar o aportar, en kJ/h, en los reactores de hidroformilación y craqueo, a partir de los valores obtenidos de los balances másicos para las diferentes corrientes.

Reactor de Hidroformilación.

El proceso es exotérmico, se necesita calcular el calor a retirar para mantener la temperatura constante a 130°C. Por tanto, se plantea como método de cálculo suponer que la reacción transcurre a 130°C, temperatura de entrada de ambas corrientes y el exceso de calor se debe eliminar.

Además, hay que tener en cuenta en este reactor que se producen tres tipos de reacciones: hidroformilación a aldehídos, hidrogenación de los aldehídos a alcoholes e hidrogenación de propileno a propano. No se tendrá en cuenta en el cálculo el calor puesto en juego para la formación de las fracciones pesadas.

En el reactor de hidroformilación (350bar) se puede suponer que todos los materiales (reactivos y productos) se encuentran en fase líquida, excepto los pertenecientes al gas de síntesis (H₂ y CO). Así, las ecuaciones que hay que aplicar para calcular el calor de reacción a 130°C, en kJ/mol, para cada una de las reacciones que se producen en este reactor son las siguientes:

$$\Delta H_{reacc}^{403K,350bar} \text{ (kJ/mol)} = \Delta H_{reacc}^{298K} + \sum \Delta H_{productos}^{298 \rightarrow 403K} - \sum \Delta H_{reactivos}^{298 \rightarrow 403K}$$

$$\sum \Delta H_i^{298 \rightarrow 403K} = \sum a_i \int_{298^\circ C}^{403^\circ C} (Cp_{vap})_i dT + \sum a_j (Cp_{liq})_j (403 - 298)$$

a_i, a_j : Coeficientes estequiométricos

Reactor de Craqueo.

El proceso es endotérmico, se necesita calcular el calor a aportar para mantener la temperatura constante a 275°C. Por tanto, se plantea como método de cálculo suponer que la reacción transcurre a 275°C, y se deber aportar calor para la reacción y para calentar los reactivos a la temperatura de reacción.

Se puede suponer que el calor de reacción del craqueo a 298K será de la misma magnitud pero con signo contrario que el dado para las reacciones de hidroformilación del propileno a 298K, en la página 1175 del texto base.

En el reactor de craqueo (1 bar) se puede suponer que el propileno, H₂ y CO se encuentran en fase gas mientras que los aldehídos permanecen en fase líquida a la temperatura a la que transcurre la reacción en condiciones estándar (25°C) y se vaporizan cuando se calientan a la temperatura de salida de los productos (275°C). Así, las ecuaciones que hay que aplicar para

calcular el calor de reacción a 275°C para cada una de las reacciones que se producen en este reactor son las siguientes:

$$\Delta H_{reacc}^{548K, 1bar} \text{ (kJ/mol)} = \Delta H_{reacc}^{298K} + \sum \Delta H_{productos}^{298 \rightarrow 548K} - \sum \Delta H_{reactivos}^{298 \rightarrow 548K}$$

$$\sum \Delta H_{reactivos}^{298 \rightarrow 548K} = \sum a_i \left[(Cp_{liq})_i (T_b - 298) + \lambda_i + \int_{T_b}^{548} (Cp_{vap})_i dT \right]$$

T_b : Tª de ebullición de los aldehídos.

$$\sum \Delta H_{productos}^{298 \rightarrow 548K} = \sum b_i \int_{298^\circ C}^{548^\circ C} (Cp_{vap})_i dT$$

a_i, b_i : Coeficientes estequiométricos

Para el cálculo de los calores específicos de los compuestos en fase gas se puede utilizar el apéndice C del texto base. El cálculo de los calores específicos en fase líquida se puede hacer utilizando la tabla 8.3 de la página 438 del texto base.

Para el cálculo del calor a retirar o aportar en cada reactor, $Q_{reactor}$ (kJ/h), se debe aplicar la siguiente ecuación general:

$$Q_{reactor} \text{ (kJ/h)} = \sum n_{reacc} \text{ (mol/h)} \cdot \Delta H_{reacc}^T \text{ (kJ/mol)}$$


n_{reacc} = nº de moles de reactivo convertidos

Incluir los resultados de los calores a retirar y aportar en los reactores en la Tabla 2.2.4.

Todos los cálculos de balances másicos y requerimientos energéticos realizados en esta actividad se incorporarán al curso virtual, Actividad 2.2, y todo ello se introducirá en el **diagrama de bloques**, y en tablas como se presenta en los diagramas ejemplo del texto base.

Tabla 2.2.4

Calores a retirar y aportar en los reactores de Hidroformilación y Craqueo.

Reactor	$Q_{reactor}$ (kJ/h)
Hidroformilación	
Craqueo	