

FISICOQUIMICA

PROBLEMAS PARA INGENIERIA QUIMICA

CONTENIDO

TERMODINÁMICA QUÍMICA

TQ1: Equilibrio homogéneo gaseoso.

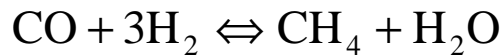
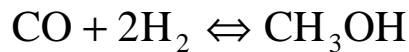
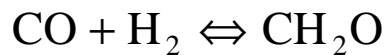
TQ2: Equilibrio heterogéneo gas-sólido.

TQ3: Equilibrio entre fases. Determinación de coeficientes de actividad de fases condensadas.

TQ4: Equilibrio fisicoquímico.

TQ1.1

Dadas las siguientes reacciones en fase gaseosa:



1) Determinar cuál de ellas es la más importante desde el punto de vista termodinámico a 600 K y 150 atm.

2) Utilizando un catalizador adecuado se produce en forma significativa sólo la segunda reacción. Teniendo en cuenta que los reactivos entran en proporciones estequiométricas (respecto a dicha segunda reacción) a la T y P del ítem anterior, calcular la temperatura de reacción adiabática y la conversión de equilibrio.

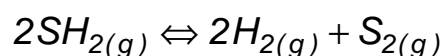
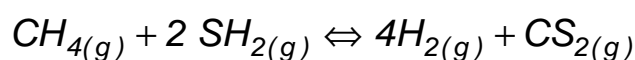
DATOS:

$$\text{CH}_3\text{OH}_{(g)} \quad C_p = 4,55 + 0,02186 T$$

$$\text{CH}_2\text{O}_{(g)} \quad C_p = 5,447 + 0,009739 T$$

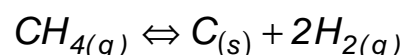
TQ1.2

Se desea producir hidrógeno a partir de gas natural y sulfuro de hidrógeno. Sabiendo que las reacciones más importantes son:



a) Determine la composición de equilibrio cuando se mezclan CH_4 y SH_2 en proporción estequiométrica (respecto a la primer reacción) y se calienta hasta 1000 K a 0,45 atm de presión.

b) Se sospecha que se puede producir la deposición de carbón según:



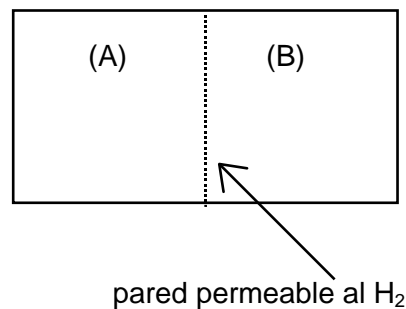
Sabiendo que para dicha reacción: $\ln K_p = 5,73 - \frac{4680}{T(K)}$, determine si tal proceso es posible.

De ocurrir, ¿qué se debería hacer para conocer la composición del sistema?

DATO: C_p del $\text{S}_{2(g)}$: $3,58 + 3 \cdot 10^{-4} T(K)$ (cal/mol K).

TQ1.3

En un recipiente como el de la figura se coloca inicialmente n-hexano (1) e hidrógeno (2) en el compartimento A a 700 K:



Las reacciones que ocurren son (fase gas):



Calcular las composiciones de equilibrio en las siguientes situaciones:

- El compartimento **(B)** se encuentra inicialmente evacuado.
- Idem a a), pero se extrae continuamente el H_2 de **(B)**.
- En **(B)** hay inicialmente 1 mol de N_2 .

DATOS:

$$n^{\circ}_1 = 1 \text{ mol}$$

$$V_A = 10 \text{ lt}$$

$$n^{\circ}_2 = 0,05 \text{ mol}$$

$$V_B = 30 \text{ lt}$$

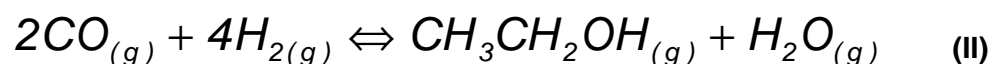
a 298 K:

(Kcal/mol)	n-hexano	1-hexeno	2-metil-1-penteno
ΔH°	-39,96	-9,96	-12,49
ΔG°	-0,06	20,90	18,55

Suponer $\Delta C_p = 0$ para ambas reacciones.

TQ 1.4

Cuando se mezclan $H_{2(g)}$ y $CO_{(g)}$ en proporciones estequiométricas sobre un catalizador apropiado, se producen las siguientes reacciones:



Suponiendo comportamiento perfecto de los gases y sabiendo que en el estado inicial sólo hay $CO_{(g)}$ e $H_{2(g)}$, calcular:

1) A qué temperatura se hace máxima la relación:

$$r = \frac{\text{moles de metanol en el equilibrio}}{\text{moles de etanol en el equilibrio}}$$

2) El valor de r a esa temperatura y la composición de equilibrio.

3) El valor de r cuando en el equilibrio hay un 20% (en moles) de gases inertes, si la reacción se lleva a cabo:

- A temperatura máxima y presión total constante.
- A temperatura máxima y volumen constante.

TQ 1.5

En un reactor se producen en forma adiabática las siguientes reacciones en fase gaseosa:



El valor de la constante de equilibrio para la segunda reacción ($K_{p2}=120$) es para la temperatura final que se alcanza en el reactor.

Las relaciones del número de moles iniciales de **A** y **E** con respecto a **B** son, respectivamente:

$$\frac{n_A^0}{n_B^0} = 0.8 \qquad \frac{n_E^0}{n_B^0} = 0.8$$

Cuando ambas reacciones llegan al equilibrio a la temperatura final alcanzada en el reactor, el número de moles de **A** y **E** que aún permanecen sin reaccionar, son iguales respectivamente al 50% y al 30% del número de moles de **B** que había inicialmente. El número de moles totales en el equilibrio es **18**.

CALCULAR:

a) El valor de K_{p1} a la temperatura final alcanzada en el reactor.

b) Los valores de Δg_1^0 y Δg_2^0 a dicha temperatura.

DATOS:

$$\begin{array}{ll} c_{pA} = 8,5 + 5 \cdot 10^{-3} T \frac{\text{cal}}{\text{K.mol}}; & c_{pB} = 10 \frac{\text{cal}}{\text{K.mol}} \\ c_{pC} = 7,2 + 10,4 \cdot 10^{-3} T \frac{\text{cal}}{\text{K.mol}}; & c_{pD} = 6,4 + 3,2 \cdot 10^{-3} T \frac{\text{cal}}{\text{K.mol}} \\ c_{pE} = 4,8 + 6,2 \cdot 10^{-3} T \frac{\text{cal}}{\text{K.mol}} & \\ \Delta h_{r(1)}^0 = -22000 \frac{\text{cal}}{\text{mol}} \quad (\text{a } 298 \text{ K}); & \Delta h_{r(2)}^0 = -18000 \frac{\text{cal}}{\text{mol}} \quad (\text{a } 298 \text{ K}) \end{array}$$

Temperatura inicial en el reactor: 57 °C.