

# TEMA 2: CONCEPTOS FUNDAMENTALES PARA LA INGENIERÍA QUÍMICA

# OBJETIVOS

- Definir la Ingeniería Química y su relación con los procesos químico-industriales.
- Destacar la importancia de los sistemas de magnitudes y de sus unidades, introduciendo el concepto de “módulo adimensional”.
- Definir los conceptos básicos relativos a un sistema: entorno, propiedad, estado y fase.
- Delimitar el estado de equilibrio, tanto bajo el punto de vista físico como químico, detallando las ecuaciones que los rigen.
- Comprender la evolución de los sistemas hacia el equilibrio, tanto físico (expresada mediante las ecuaciones de transporte) como químico (expresada mediante las ecuaciones cinéticas).
- Establecer las propiedades susceptibles de cambio en un sistema (materia, energía, cantidad de movimiento), así como los modelos matemáticos que permitan su estudio.
- Delimitar el estudio posterior de los procesos químicos mediante la utilización de balances de materia y energía macroscópicos.

## 2.1 Ingeniería Química y procesos industriales

Definición de Ingeniería Química (J. Cathalá, 1951 y M. Letort, 1961):

*“Arte de concebir, calcular, diseñar, hacer construir y hacer funcionar instalaciones donde efectuar a escala industrial cualquier transformación química u operación física de separación inmediata”.*

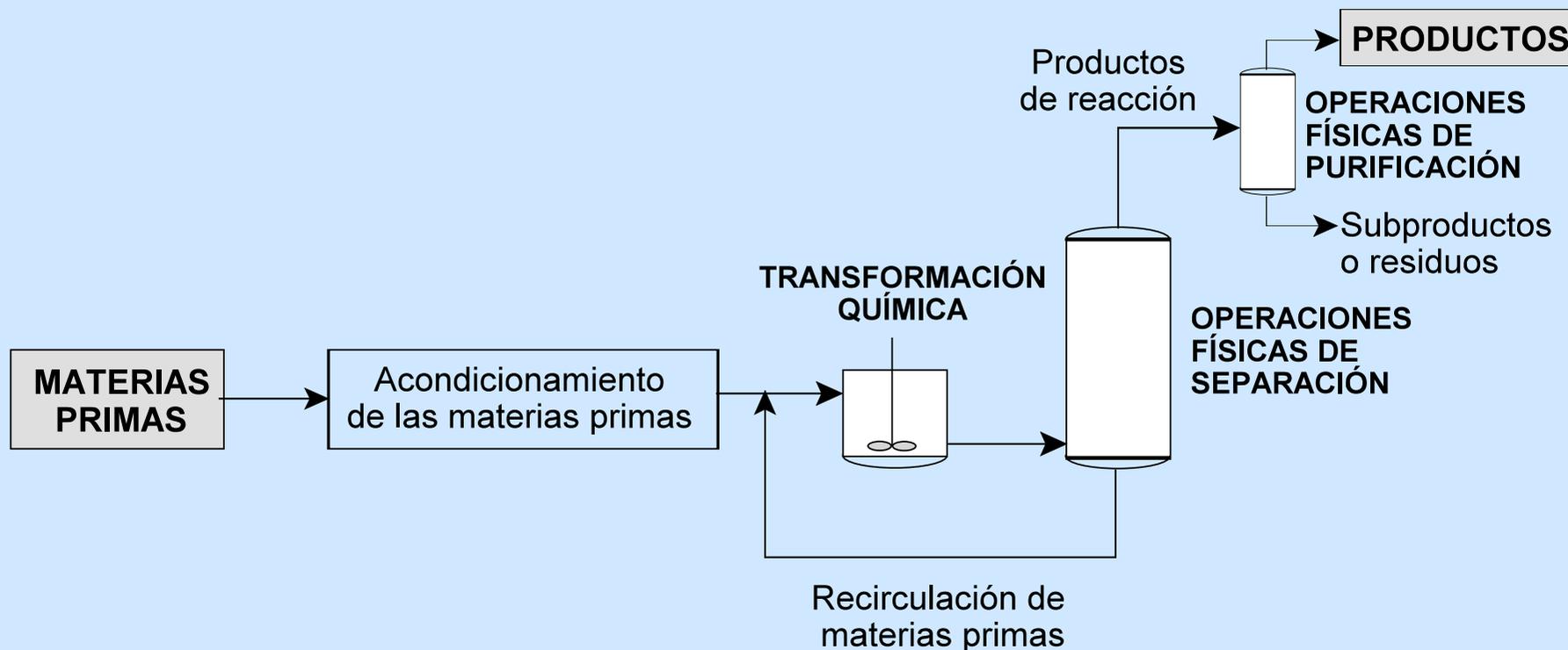
Disciplina que **sistematiza** los conceptos físicos y químicos para su aplicación al diseño, desarrollo y operación de procesos a **escala industrial**.

Participa en el **sector químico** y en otros sectores industriales:

- Metalurgia
- Producción de energía
- Tecnología ambiental
- Tecnología alimentaria

**Industria química:** Obtención de **productos** a partir de **materias primas**.

**Proceso químico:** Diversas operaciones relacionadas entre sí; reacciones químicas y operaciones físicas de tratamiento o separación (**Figura 2.1**).



**Figura 2.1:** Procesos químico-industriales.

## Bases del conocimiento para el estudio de los procesos químicos: (Figura 2.2):

- Estado de equilibrio: Equilibrio entre fases, equilibrio químico.
- Procesos cinéticos: Fenómenos de transporte, cinética química.
- **Ecuaciones de conservación** (balances): Materia, energía, momento.
- Aspectos complementarios: Propiedades de los materiales; instrumentación y control; economía, estrategia, optimización.

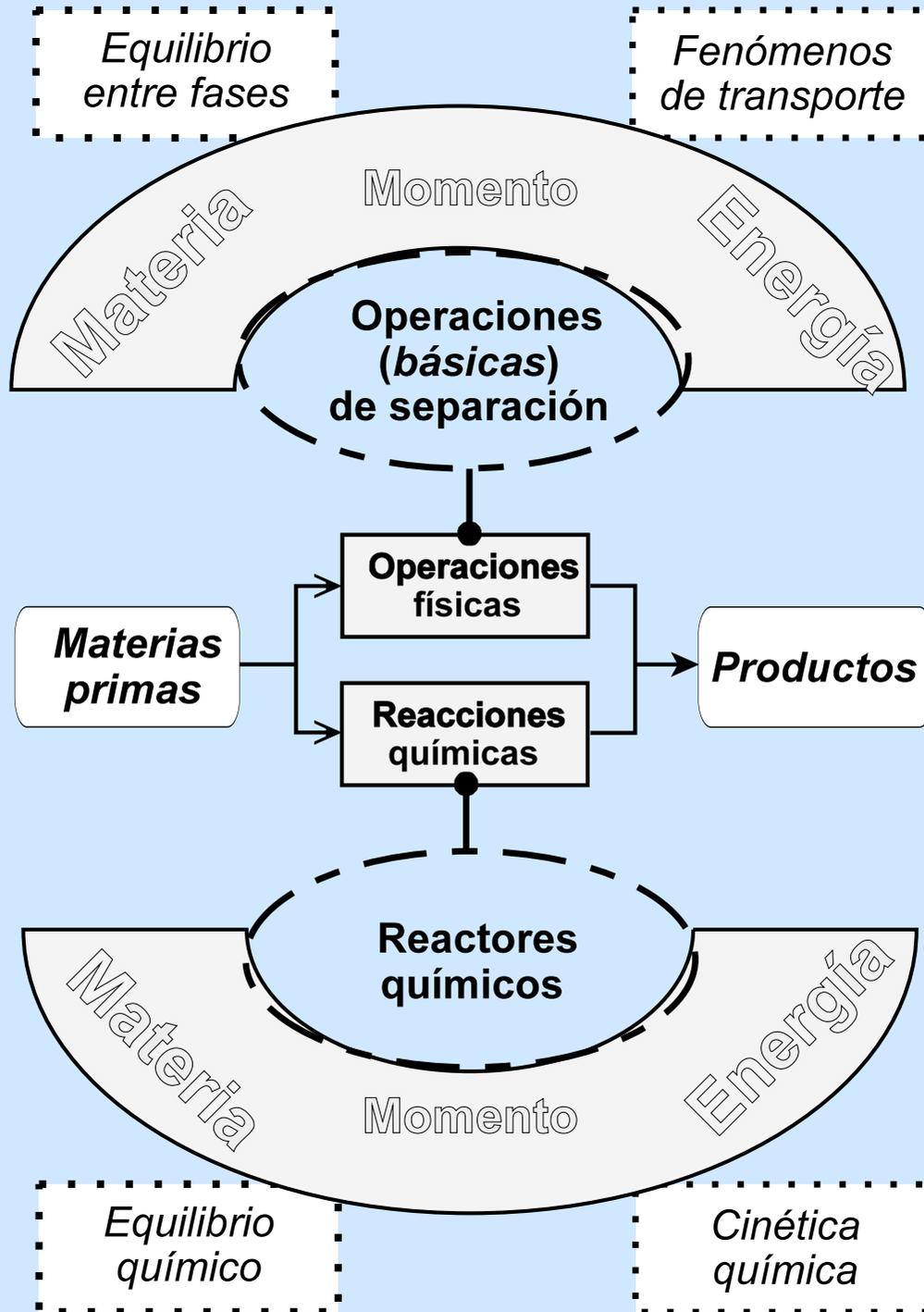


Figura 2.2: Estudio de los procesos químico-industriales.

## 2.2 Sistemas de magnitudes y unidades

**Magnitud:** Propiedad o cualidad física susceptible de medida.

**Unidad:** Valor obtenido al fijar arbitrariamente la cantidad de una magnitud.

**Sistema de magnitudes:** Conjunto de magnitudes **fundamentales** (elegidas arbitrariamente) y **derivadas** (obtenidas a partir de las fundamentales mediante ecuaciones de definición).

**Sistema de unidades:** Conjunto reducido de unidades, elegido arbitrariamente, que permite medir todas las magnitudes.

Diversos sistemas de magnitudes (absolutos, técnicos, ingenieriles) y de unidades (métrico, inglés), normalizados por la *XI Conferencia General de Pesas y Medidas* (París, 1960) en el **Sistema Internacional de Unidades, S.I.**, declarado de uso legal en España (Ley 3/1987, de 18 de marzo, de Metrología).

## 2.2.1 Conversión de unidades

**Factor de conversión:** Número de unidades de una magnitud de un sistema de unidades en una unidad de la misma magnitud de otro sistema.

## 2.2.2 Ecuaciones dimensionales

**Dimensión:** Característica de una magnitud física expresada en términos de sus unidades fundamentales, de forma simbólica (M, L, t, T).

Las ecuaciones deducidas a partir de leyes físicas son siempre dimensionalmente homogéneas.

Las ecuaciones empíricas deducidas como resultado de la experimentación pueden no ser dimensionalmente homogéneas.

**Módulo adimensional:** Combinación de variables tal, que sus dimensiones se anulan.

## 2.3 Definiciones básicas relativas a un sistema

**Sistema:** Región del espacio perfectamente definida y circunscrita por unos **límites** a los efectos de su análisis; la región externa a los límites se denomina **entorno**.

**Sistema abierto** (continuo; con flujo): Sistema en el que se producen intercambios de **materia** con su entorno.

**Sistema cerrado** (por lotes; sin flujo): Sistema aislado de su entorno.

**Propiedad:** Característica medible o calculable de un sistema.

**Propiedad intensiva:** Propiedad **independiente** de la cantidad de materia del sistema.

**Propiedad extensiva:** Propiedad **dependiente** de la cantidad de materia del sistema.

**Estado:** Conjunto único de propiedades de un sistema en un momento dado; sólo depende de sus propiedades intensivas.

**Ecuación de estado:** Relación matemática entre las propiedades que caracterizan el estado de un sistema.

**Fase:** Estado completamente homogéneo y uniforme de la materia.

## 2.4 El estado de equilibrio

Un sistema está en equilibrio cuando su estado no puede experimentar ningún cambio espontáneo.

**Grados de libertad:** Número de propiedades de un sistema que definen el estado de equilibrio.

**Regla de las fases (Gibbs):** Relaciona los grados de libertad con el número de componentes y el número de fases de un sistema:

$$F + L = C + 2 \quad [2.1]$$

## 2.4.1 Equilibrio entre fases

La condición de equilibrio entre fases implica el reparto de cada componente entre las fases según proporciones que sólo dependen de T y P.

**Coeficiente de reparto:** Relación utilizada para expresar el equilibrio entre las fases:

$$k_i = \frac{y_i}{x_i} \quad [2.2]$$

- Sistemas líquido - vapor: **Ley de Dalton - Raoult:**

$$\frac{y_i}{x_i} = \frac{P_i^0}{P} \quad [2.3]$$

- Sistemas líquido - gas: **Ley de Henry:**

$$\frac{y_i}{x_i} = \frac{H_i}{P} \quad [2.4]$$

**Diagramas de equilibrio:** Representaciones gráficas sobre el estado de equilibrio en diferentes condiciones.

## 2.4.2 Equilibrio químico

**Ecuación estequiométrica:** Representación de la naturaleza de un cambio químico, según las proporciones (coeficientes estequiométricos) en que se combinan las especies:



**Constante de equilibrio:** Descripción del estado de equilibrio químico; para sistemas ideales (para P y T constantes):

$$K = \frac{C_R^r C_S^s}{C_A^a C_B^b} \quad [2.6]$$

## 2.5 La evolución hacia el equilibrio

Los cambios de un sistema que tiende hacia el equilibrio se expresan mediante **leyes cinéticas**, que no están tan bien establecidas como las del estado de equilibrio.

## 2.5.1 Fenómenos de transporte

La velocidad con la que un sistema evoluciona hacia el equilibrio, provocando un transporte, es directamente proporcional al **potencial impulsor** e inversamente proporcional a la **resistencia** que el sistema opone a dicho transporte (formalismo de ley de Ohm):

$$\varphi = \frac{d\Gamma}{dt} = \frac{\Delta\Pi}{R} \quad [2.7]$$

## 2.5.2 Cinética química

La velocidad con que un sistema reaccionante evoluciona hacia el equilibrio depende de diversos factores, cuya formulación se denomina **ecuación cinética**:

$$r_i = \frac{dN_i}{dt} = f(C, T, \eta) \quad [2.8]$$

## 2.6 Ecuaciones de conservación: modelos

Únicos cambios posibles que puede sufrir un sistema:

- Materia (masa o composición).
- Energía (cantidad o calidad).
- Movimiento (velocidad o dirección).

**Ecuación de conservación** (balance): Expresión de una ley de conservación de una propiedad extensiva de un sistema:

$$E + G = S + A \quad [2.9]$$

E: Velocidad de entrada de propiedad al sistema.

G: Velocidad de generación de propiedad en el interior del sistema.

S: Velocidad de salida de propiedad del sistema.

A: Velocidad de acumulación de propiedad en el interior del sistema.

## Modelo matemático:

- Ecuaciones de conservación
- Ecuaciones de estado
- Ecuaciones de equilibrio
- Ecuaciones cinéticas

## Tipos de modelos (materia como medio continuo):

- **Macroscópico**, fenomenológico, o de “caja negra”:

- Baja complejidad matemática: aplicación de ecuaciones de conservación a recintos finitos produce **ecuaciones algebraicas**.

- **Microscópico**, representacional, o de “caja con mecanismos”:

- Alta complejidad matemática: aplicación de ecuaciones de conservación a elementos diferenciales produce **ecuaciones diferenciales**.