

Universidad Simón Bolívar

Departamento de Termodinámica y Fenómenos de Trasferencia

De Ponte Moniz, Luis Gabriel

PROBLEMAS DE REACCIONES EN EQUILIBRIO

PROBLEMA 1. Reacción en fase de vapor

Para la reacción de síntesis de metanol:

$$CO(g) + 2H_2(g) \leftrightarrow CH_3OH(g)$$

La conversión de equilibrio a 298K es considerable pero disminuye rápidamente cuando aumenta la temperatura. Desafortunadamente la reacción solo es controlable a altas temperaturas. Si la alimentación consiste de una mezcla de CO y H₂ proporciones estequiometricas. Calcular:

- a) La fracción molar de equilibrio de metanol a 1bar y 298,15K
- b) A que temperatura es la fracción molar de metanol de equilibrio para el metanol igual a 0,50 para una presión de 1bar.
- c) A que temperatura es la fracción molar de metanol de equilibrio igual a 0,50 para una presión de 100 bar? (Suponga comportamiento de gas ideal)

Solución a:

La fracción molar de metanol por definición es equivalente a:

$$y_{CH_3OH} = \frac{n_{CH_3OH}}{n_{totales}}$$

En esta reacción de equilibrio se tendrán moles de CH_3OH , H_2 y CO porque no se puede garantizar que todo el equilibrio se desplaza hacia la derecha sin conocer las constantes de equilibrio:

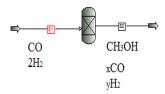


Figura 1. Entrada y salida de un reactor de síntesis de metanol

La composición del metanol a la salida del reactor es:

$$y_{CH_3OH} = \frac{n_{CH_3OH}}{n_{totales}} = \frac{n_{CH_3OH}}{n_{CH_3OH} + n_{CO} + n_{H_2}}$$

Para conocer la fracción de metanol es necesario conocer la constante de equilibrio. Puesto que la cantidad de moles de metanol depende de la constante de equilibrio.

Calculamos la constante de equilibrio a 298 Kelvin.

$$K_{298} = exp\left(-\frac{\sum \Delta Greac(T, P)}{RT}\right) = exp\left(-\frac{\sum \Delta Greac(298K, 1bar)}{R(298)}\right) = exp\left(-\frac{\sum \alpha_i \mu f_i^\circ}{R(298K)}\right)$$

Los potenciales químicos de formación los podemos leer de cualquier apéndice o bibliografía:

$$K_{298} = exp\left(-\left(\frac{1*\mu f^{\circ}_{CH_3OH} - 1*\mu f^{\circ}_{CO} - 2*\mu f^{\circ}_{H_2}}{(8,314)(298)}\right)\right)$$

<u>Nota:</u> Los coeficientes estequiometricos de los productos tienen signo positivo y el coeficiente estequiometrico de los reactivos tienen signo negativo.

$$K_{298} = exp\left(-\left(\frac{1*(-161960) - 1*(-137169) - 2*(0)}{(8,314)(298)}\right)\right) = 22162,73$$

Para K > 1 la reacción se ve favorecida hacia los productos para un valor de $K_{298} = 22162,73 \gg 1$ podemos concluir que $y_{CH_3OH} = 1$, a estas condiciones de temperatura y presión.

Solución b:

Buscamos el valor de la constante de equilibrio en función de la temperatura y la presión considerando que $y_{CH_2OH} = 0.5$

$$K(T,P) = \prod_{i=1}^{c} (a_i)^{\alpha_i} = \prod_{i=1}^{c} \left(\frac{\widehat{f}_i(T,P)}{f_i(T,P^\circ)}\right)^{\alpha_i} = \prod_{i=1}^{c} \left(\frac{y_i \widehat{\phi}_i P}{\phi_i P^\circ}\right)^{\alpha_i}$$

Nota: Recuerde que $\widehat{\phi}_{\iota}$ representa el coeficiente de fugacidad parcial y se calcula diferente ϕ_{i} que representa el coeficiente de fugacidad para una solución ideal, es decir el de una sustancia como componente puro.

A 1bar de presión podemos suponer que la fase vapor en la cual ocurre en la reacción se comporta como gas ideal. Adicionalmente como la reacción ocurre a la misma presión estándar P° =1bar por lo cual tenemos que:

$$K(T,P) = \prod_{i=1}^{c} \left(\frac{y_i P}{P^{\circ}}\right)^{\alpha_i} = \prod_{i=1}^{c} (y_i P)^{\alpha_i}$$

Nota: P° =1bar y así se sustituyó en la igualdad por lo cual P debe ser sustituida en la ecuación en bar.

$$K(T,P) = \prod_{i=1}^{c} (y_i P)^{\alpha_i} = (y_{CH_3OH} P)^1 * (y_{H_2} P)^{-2} * (y_{CO} P)^{-1}$$

$$K(T,P) = \frac{(P_{CH_3OH})^1}{(P_{H_2})^2 (P_{CO})^1} = \frac{y_{CH_3OH}}{y_{H_2}^2 * y_{CO}} * \frac{1}{P^2}$$

<u>Nota:</u> Observe que para una solución en fase gas en donde la fase de vapor se comporta como gas ideal, la constante de equilibrio es equivalente a la presión parcial de los productos elevados a sus coeficientes estequiometricos entre la presión parcial de los reactantes elevados a sus coeficientes estequiometricos. (Tal cual como en química 2).

Para determinar la contante de equilibrio es necesario conocer las composiciones de los componentes. Como la reacción ocurre de forma estequiometrica se cumple que:

$$CO(g) + 2H_2(g) \leftrightarrow CH_3OH(g)$$

Considerando que ϵ representa el grado de avance de la reacción se cumple que:

$$n_s C H_3 O H = n_e C H_3 O H + \sum \alpha_{ij} \varepsilon_{ij} = 0 + 1 * \varepsilon = \varepsilon$$

$$n_s H_2 = n_e H_2 - 2 * \varepsilon = 2 - 2\varepsilon$$

$$n_s C O = n_e C O - 1 * \varepsilon = 1 - \varepsilon$$

$$n_{total} = n_s C H_3 O H + n_s H_2 + n_s C O = 3 - 2\varepsilon$$

De esta forma se tiene que:

$$y_{CH_3OH} = \frac{n_s CH_3OH}{n_{total}} = \frac{\varepsilon}{3 - 2\varepsilon} = 0.50 \rightarrow \varepsilon = 0.75$$

$$y_{H_2} = \frac{n_s H_2}{n_{total}} = \frac{2 - 2\varepsilon}{3 - 2\varepsilon} = 0.33$$

$$y_{CO} = \frac{n_s CO}{n_{total}} = \frac{1 - \varepsilon}{3 - 2\varepsilon} = 0.17$$

Por lo cual la constante de equilibrio es equivalente:

$$K(T,P) = \frac{0.50}{0.33^2 * 0.17} \left(\frac{1}{1^2}\right) = 27$$

Es necesario encontrar una expresión para la constante de equilibrio en función de la temperatura de equilibrio. Para ello consideramos la correlación termodinámica:

$$d\left(\frac{n\Delta G_{reac}}{RT}\right) = \frac{n\Delta V_{reac}}{RT} dP - \frac{n\Delta Hreac}{RT^2} dT + \sum \left(\frac{\partial \left(\frac{n\Delta Greac}{RT}\right)}{\partial n_i}\right) dn_i$$

$$T,P,n_i$$

De la cual se deduce por correlaciones de Maxwell que:

$$-\frac{n\Delta Hreac}{RT^2} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{n\Delta G_{reac}}{RT} \right) \rightarrow \frac{\Delta Hreac}{RT^2} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{-\Delta G_{reac}}{RT} \right)$$

Considerando que:

$$\frac{-\Delta G_{reac}}{RT} = lnK$$

Tenemos la ecuación diferencial:

$$\frac{\partial}{\partial T}(lnK) = \frac{\Delta Hreac(T)}{RT^2}$$

El calor de reacción depende de la temperatura y el mismo se puede determinar al considerar que la reacción a presión constante ocurre en dos etapas: la primera de ellas es un proceso en el cual ocurre la reacción a condiciones estándar, la segunda y última etapa consiste en el calentamiento de los elementos químicos hasta la temperatura de salida de la reacción (del reactor sale el producto y los compuestos inertes y de exceso).

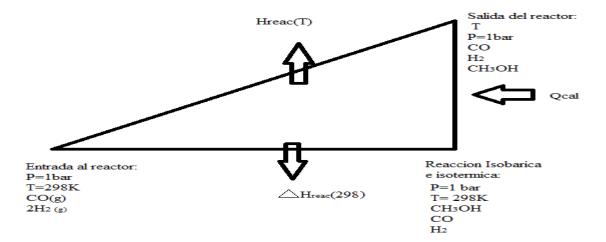


Figura 2. Esquema de la forma en que se determina el calor de reacción.

<u>Nota:</u> El sentido de las flechas de los calores están establecido para una reacción exotérmica. Para una reacción endotérmica las fechas de los calores de reacción se invierten en el esquema.

De esta forma tenemos:

$$\Delta Hreac(T) = \Delta H_R^{298K} + \sum_{T} \int_{T}^{T} \alpha_i Cp_i(T) dT$$

Definimos el polinomio $\Delta Cp(T) = \sum_{T^{\circ}} Cp_i(T) dT$ de esta forma se obtiene que:

$$\frac{\partial}{\partial T}(lnK) = \frac{\Delta Hreac(T)}{RT^{2}}$$

$$\frac{\partial}{\partial T}(lnK) = \frac{\Delta H_{R}^{298K} + \sum_{T_{i}^{T}} \alpha_{i}Cp_{i}(T)dT}{RT^{2}}$$

Separando variables tenemos:

$$dlnk = \left(\frac{\Delta H_R^{298K} + \sum \int_{T_c}^{T} \alpha_i Cp_i(T) dT}{RT^2}\right) dT$$

Integrando desde T° hasta T tenemos que:

$$\int_{k298}^{K} dlnk = \int_{T^{\circ}}^{T} \left(\frac{\Delta H_{R}^{298K} + \sum \int_{T^{\circ}}^{T} \alpha_{i} C p_{i}(T) dT}{RT^{2}} \right) dT$$

$$\ln \left(\frac{k}{k298} \right) = \frac{-\Delta H_{R}^{298}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^{\circ}} \right) + \frac{1}{R} \int_{T_{o}}^{T} \frac{\Delta C_{P}}{T^{2}} dT$$

$$K(T) = K_{298} exp \left(\frac{-\Delta H_{R}^{298}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^{\circ}} \right) + \frac{1}{R} \int_{T_{o}}^{T} \frac{\Delta C_{P}}{T^{2}} dT \right)$$

Si se considera la correlación de Van Hoff se obtiene que $\frac{1}{R} \int_{To}^{T} \frac{\Delta C_P}{T^2} dT = 0$ puesto que ese término se considera despreciable con respecto a la cantidad de calor estándar de reacción que se desprende a (298 K). La correlación de Van Hoff solo es válida solo para ciertos rangos de temperatura. En este caso se considerara real la temperatura obtenida por el factor de Van Hoff.

$$K(T) = K_{298} exp\left(\frac{-\Delta H_R^{298}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^{\circ}}\right)\right)$$

Calculamos la entalpia estándar de reacción:

$$\Delta H_R^{298} = \sum \alpha_i H f_i = 1 * H f_{CH_3OH} - 2 * H f_{H_2} - 1 * H f_{CO}$$

$$\Delta H_R^{298} = -200660 - 2*(0) - 1*(-110525) = -90135 J/mol$$

Sustituyendo tenemos:

$$K(T) = 27 = 22162,73exp\left(\frac{-(-90135)}{8,314}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298}\right)\right)$$

Determinamos el valor el valor de T = 365,39 K

Solución c: Determinamos la temperatura para $y_{CH_3OH} = 0.5$ y P=100 bar de esa forma tenemos:

Como $y_{CH_3OH} = 0.5$ se cumple que al igual que el caso B

$$y_{CH_3OH} = \frac{n_s CH_3OH}{n_{total}} = \frac{\varepsilon}{3 - 2\varepsilon} = 0.50 \rightarrow \varepsilon = 0.75$$

$$y_{H_2} = \frac{n_s H_2}{n_{total}} = \frac{2 - 2\varepsilon}{3 - 2\varepsilon} = 0.33$$

$$y_{CO} = \frac{n_s CO}{n_{total}} = \frac{1 - \varepsilon}{3 - 2\varepsilon} = 0.17$$

Para corregir la constante de equilibrio por presión tenemos que:

$$K(T,P) = \prod_{i=1}^{c} \left(\frac{y_i P}{P^{\circ}}\right)^{\alpha_i} = \prod_{i=1}^{c} (y_i P)^{\alpha_i}$$

Nota: P° =1bar y así se sustituyó en la igualdad por lo cual P debe ser sustituida en la ecuación en bar.

$$K(T,P) = \prod_{i=1}^{c} (y_i P)^{\alpha_i} = (y_{CH_3OH} P)^1 * (y_{H_2} P)^{-2} * (y_{CO} P)^{-1}$$

$$K(T,P) = \frac{\left(P_{CH_3OH}\right)^1}{\left(P_{H_2}\right)^2 (P_{CO})^1} = \frac{y_{CH_3OH}}{y_{H_2}^2 * y_{CO}} * \frac{1}{P^2} = 27 * \left(\frac{1}{100^2}\right)$$

Considerando la correlación de Van Hoff para corregir por temperatura:

$$K(T,P) = 27 * \left(\frac{1}{100^2}\right) = 22162,73exp\left(\frac{-(-90135)}{8,314}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298}\right)\right)$$

De aquí se obtiene que T = 529.8K

PROBLEMA 2. Reacción en fase liquida.

Considere la siguiente reacción de isomerización en <u>equilibrio</u> que ocurre en fase líquida a una temperatura de 350 K:

$$A_{(l)} \rightleftarrows B_{(l)}$$

Donde A y B son líquidos miscibles que forman una solución para los cuales

$$\frac{g^E}{RT} = \left(\frac{578,6}{T} - 2,306 + 0,003216T\right) x_A x_B$$

La constante de equilibrio de la reacción anterior se expresa mediante

$$\ln K = \frac{401.2}{T} + 0.1044 \ln T - 0.64$$

donde T está en grados Kelvin. Considere un reactor catalítico <u>isotérmico</u> donde entra el componente *A* puro y los productos salen a la composición de equilibrio.

- (a) Calcule la composición a la salida del reactor en fracción molar y la conversión del componente *A*.
- (b) Encuentre el calor transferido en el reactor por mol del componente A en kJ/kmol.

SOLUCIÓN:

(a) La constante de equilibrio en fase líquida se expresa mediante

$$K = \frac{\hat{f}_B/f_B^{\circ}}{\hat{f}_A/f_A^{\circ}} = \frac{\frac{\gamma_B x_B f_B^L}{f_B^{\circ}}}{\frac{\gamma_A x_A f_A^L}{f_A^{\circ}}}$$

Como la fugacidad de la fase líquida puede emplearse la siguiente aproximación de la fugacidad de la fase líquida por la fugacidad del estado estándar:

$$\ln\left(\frac{f_A^L}{f_A^\circ}\right) = \int_{P^\circ}^P \frac{v_A^L}{RT} dP \approx 0 \quad \Rightarrow \quad f_A^L = f_A^\circ \quad \Rightarrow \quad K = \frac{\gamma_B x_B}{\gamma_A x_A}$$

Luego, se aplican logaritmos ambos lados de la igualdad

$$\ln K = \ln \gamma_B + \ln x_B - \ln \gamma_A - \ln x_A \quad \Rightarrow \quad \ln \gamma_B - \ln \gamma_A + \ln \left(\frac{x_B}{x_A}\right) - \ln K = 0$$

El logaritmo de la constante de equilibrio a 350 K viene dado por:

$$\ln K = \frac{401.2}{350} + 0.1044 \ln(350) - 0.64 = 1.11785$$

Donde los coeficientes de actividad se determinan a partir de la ecuación de Margules:

$$\frac{g^E}{RT} = Ax_A x_B \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} \ln \gamma_A = Ax_B^2 \\ \ln \gamma_B = Ax_A^2 \end{cases}$$

Sustituyendo expresiones y valores se tiene que

$$Ax_A^2 - Ax_B^2 + \ln\left(\frac{x_B}{x_A}\right) - \ln K = 0 \quad \Rightarrow \quad Ax_A^2 - A(1 - x_A)^2 + \ln\left(\frac{1 - x_A}{x_A}\right) - \ln K = 0$$

$$A(2x_A - 1) + \ln\left(\frac{1 - x_A}{x_A}\right) - \ln K = 0 \quad \Rightarrow \quad 0.4727(2x_A - 1) + \ln\left(\frac{1 - x_A}{x_A}\right) - 1.11785 = 0$$

$$x_A = 0.1972 \quad \Rightarrow \quad x_B = 1 - x_A = 1 - 0.1972 = 0.8028$$

Formulando el balance de moles para cada componente:

$$\begin{cases} \dot{n}_{A,0} - \dot{n}_A - \varepsilon = 0 \\ \dot{n}_{B,0} - \dot{n}_B + \varepsilon = 0 \end{cases} \Rightarrow \dot{n} = \dot{n}_A + \dot{n}_B = \dot{n}_{A,0}$$

Y la conversión fraccional ξ_A es

$$\xi_A = \frac{\dot{n}_{A,0} - \dot{n}_A}{\dot{n}_{A,0}} = 1 - \frac{\dot{n}_A}{\dot{n}_{A,0}} = 1 - \frac{\dot{n}_A}{\dot{n}} = 1 - x_A = 0.8028 (80\%)$$

Y los moles del componente B producidos por mol de A de alimentación:

$$\frac{\dot{n}_B}{\dot{n}_{A,0}} = \frac{x_B \dot{n}}{\dot{n}_{A,0}} = x_B = 0,1972$$

(b) La entalpía estándar de reacción a una temperatura arbitraria es

$$\Delta H^{\circ} = -RT^{2} \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\Delta G^{\circ}}{RT} \right) \right)_{P} = RT^{2} \left(\frac{\partial}{\partial T} (\ln K) \right)_{P} = RT^{2} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{401,2}{T} + 0,1044 \ln T - 0,64 \right) =$$

$$= RT^{2} \left(-\frac{401,2}{T^{2}} + \frac{0,1044}{T} \right) = R(-401,2 + 0,1044T)$$

Evaluando la entalpía estándar de reacción a 350 K:

$$\Delta H^{\circ} = 8,314 \cdot (-401,2 + 0,1044 \cdot 350) = -3032 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}$$

Hallando una expresión para la entalpía de exceso

$$h^{E} = -RT^{2} \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{g^{E}}{RT} \right) \right)_{P,x_{j}} = -RT^{2} \frac{\partial}{\partial T} \left(A(T) x_{A} x_{B} \right) = -RT^{2} x_{A} x_{B} \frac{dA}{dT}$$

$$h^{E} = -RT^{2}x_{A}x_{B}\frac{d}{dT}\left(\frac{578,6}{T} - 2,306 + 0,003216T\right) = -RT^{2}x_{A}x_{B}\left(-\frac{578,6}{T^{2}} + 0,003216\right)$$

Evaluando la entalpía de exceso a 350 K y a la composición de equilibrio:

$$h^E = -8,314 \cdot 350^2 \cdot 0,1972 \cdot 0,8028 \cdot \left(-\frac{578,6}{350^2} + 0,003216 \right) = 243 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}$$

Por último, planteando el balance de energía en el reactor

$$\dot{Q} = \dot{n}_B \Delta H^\circ + (\dot{n}_A + \dot{n}_B) h^E \quad \Rightarrow \quad \frac{\dot{Q}}{\dot{n}_{A,0}} = q = \frac{\dot{n}_B}{\dot{n}_{A0}} \Delta H^\circ + h^E$$

$$q = \frac{\dot{n}_B}{\dot{n}_{A0}} \Delta H^{\circ} + h^E = x_B \Delta H^{\circ} + h^E = 0,8028 \cdot (-3032) + 243 = -2191 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol A}}$$

PROBLEMA 3. Descomposición utilizando destilación reactiva

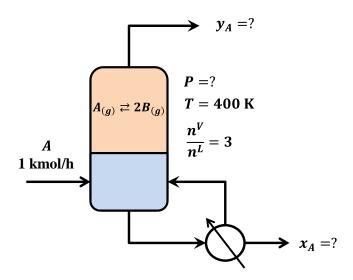
La siguiente reacción de descomposición en equilibrio:

$$A_{(g)} \rightleftarrows 2B_{(g)}$$

se lleva a cabo utilizando un sistema de *destilación reactiva* a 400 K. Puede considerarse que la reacción ocurre exclusivamente en la <u>fase gaseosa</u>. La constante de equilibrio de la reacción se expresa mediante

$$\ln K = \frac{564,7}{T} + 0.113 \ln T + 0.66 - 0.00025T$$

Donde *T* está en grados Kelvin. Considere un reactor cuya alimentación es 1 kmol/h del componente A y se desea tener una relación de flujos moles de vapor/moles de líquido de 3 en la salida del reactor. Suponga que la fase líquida se comporta como una solución ideal y la fase vapor se comporta como un gas ideal. Las presiones de vapor de los componentes A y B a 400 K son 0,04 y 0,5 bar respectivamente.



- (a) Calcule las composiciones de la fase líquida y la fase vapor.
- (b) Determine la presión del sistema.
- (c) Halle los flujos molares de líquido y vapor.
- (d) Halle la conversión del componente A y el rendimiento de obtención de B en el destilado (fase gas).

SOLUCIÓN:

Las ecuaciones de líquido-vapor

$$\begin{cases} \hat{f}_A^V = \hat{f}_A^L & \Rightarrow & y_A P = x_A P_A^{sat} \\ \hat{f}_B^V = \hat{f}_B^L & \Rightarrow & y_B P = x_B P_B^{sat} \end{cases}$$

$$P = x_A P_A^{sat} + x_B P_B^{sat} = x_A P_A^{sat} + (1 - x_A) P_B^{sat}$$

La constante de equilibrio der la reacción en fase gas se plantea como

$$K = \frac{\left(\hat{f}_{B}/P^{\circ}\right)^{2}}{\hat{f}_{A}/P^{\circ}} = \frac{\left(\frac{y_{B}P}{P^{\circ}}\right)^{2}}{\frac{y_{A}P}{P^{\circ}}} = \frac{\left(\frac{x_{B}P_{B}^{sat}}{P^{\circ}}\right)^{2}}{\frac{x_{A}P_{A}^{sat}}{P^{\circ}}} = \frac{(x_{B}P_{B}^{sat})^{2}}{x_{A}P_{A}^{sat}} \cdot \frac{1}{P^{\circ}}$$

$$K = \frac{\left((1 - x_A)P_B^{sat}\right)^2}{x_A P_A^{sat}} \cdot \frac{1}{P^{\circ}}$$

Aplicando logaritmos a la ecuación anterior

$$\ln K = 2\ln(1 - x_A) - \ln x_A + \ln\left(\frac{(P_B^{sat})^2}{P_A^{sat}P^{\circ}}\right)$$

Calculando el logartimo de la constante de equilibrio a 400 K:

$$\ln K = \frac{564,7}{400} + 0,113\ln(400) + 0,66 - 0,00025 \cdot 400 = 2,6488$$

Sustituyendo, se resuelve el valor de x_A :

$$2,6488 = 2\ln(1 - x_A) - \ln x_A + \ln\left(\frac{0.5^2}{0.04 \cdot 1}\right)$$

$$x_A = 0.2492$$
 \Rightarrow $x_B = 1 - x_A = 1 - 0.2492 = 0.7508$

Con esto se tiene la presión total:

$$P = x_A P_A^{sat} + (1 - x_A) P_B^{sat} = 0.2492 \cdot 0.04 + (1 - 0.2492) \cdot 0.5 = 0.3854$$
 bar

Y la composición de la fase vapor:

$$y_A = \frac{x_A P_A^{sat}}{P} = \frac{0.2492 \cdot 0.04}{0.3854} = 0.02587$$
 \Rightarrow $y_B = 1 - y_A = 1 - 0.0259 = 0.9741$

Formulando los balances de moles para los componentes A y B:

$$A: \quad n_{A,0}-n_A^L-n_A^V-1\varepsilon=0$$

$$B:\quad n_{B,0}-n_B^L-n_B^V+2\varepsilon=0$$

$$n_0 - n^L - n^V + \varepsilon = 0$$

Además $n_A^L=x_An^L$, $n_B^L=x_Bn^L$, $n_A^V=y_An^V$, $n_B^V=y_Bn^V$, $n_0=n_{A0}$

$$\begin{cases} n_{A,0} - x_A n^L - y_A n^V = \varepsilon \\ n^L + n^V = n_{A0} + \varepsilon \end{cases}$$
$$n^V = 3n^L$$

Sustituyendo los valores conocidos

$$\begin{cases} 1 - 0.2492n^{L} - 0.02587n^{V} = \varepsilon \\ n^{L} + n^{V} = 1 + \varepsilon \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1 - 0.2492n^{L} - 0.02587n^{V} = n^{L} + n^{V} - 1 \\ n^{V} = 3n^{L} \end{cases}$$

$$1 - 0.2492n^{L} - 0.02587 \cdot 3n^{L} = n^{L} + 3n^{L} - 1 \quad \Rightarrow \quad n^{L} = 0.4622 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

$$n^V = 3n^L = 3 \cdot 0.4622 = 1.3867 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Luego, la conversión de A es

$$\chi_A = \frac{n_{A0} - n_A^V - n_A^L}{n_{A0}} = \frac{1 - y_A n^V - x_A n^L}{1} = \frac{1 - 0.2492 n^L - 0.02587 n^V}{1} = 0.85 (85\%)$$

El rendimiento de obtención de B en la fase gas se define como:

$$Y_B = \frac{\text{moles de B en la fase gas}}{\text{moles B reacción teórica}} = \frac{y_B n^V}{2} = \frac{0.9741 \cdot 1.3867}{2} = 0.68 (68\%)$$

Por lo que se recupera en la fase gas un 68% de B respecto a la cantidad máxima de B que puede producirse en la reacción química.