

RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS.

T=teoría

P=hoja de Problemas

T6.1. La radiactividad de fondo debida al radón es de 1 pCi/L, la emisión de radón natural del suelo es de $0.42 \text{ pCi m}^{-2} \text{ s}^{-1}$, que corresponde a la media del planeta. Calcular el nivel de radiación en una vivienda de 100 m^2 , 250 m^3 , que intercambia aire con el exterior al ritmo de $250 \text{ m}^3/\text{h}$. Y en una casa de alto rendimiento energético que intercambia $25 \text{ m}^3/\text{h}$? Se despreciará la pérdida de radiactividad por desintegración. Un nivel por debajo de 4 pCi/L no se considera problemático.

Aplicamos el modelo de celda fija:

$$c_i = c_0 + \frac{S - R}{Q}$$

$c_0 = 1 \text{ pCi/L}$ (radiación exterior)

La cantidad de radiación emitida en la vivienda es:

$$S = 0.42 * 100 = 42 \text{ pCi/s}$$

Mientras que R se considera 0.

El caudal es:

$$\text{a) } Q = 250 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \times \frac{1000 \text{ L}}{1 \text{ m}^3} \times \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 69.4 \text{ L/s}$$

$$c_i = 1.61 \text{ pCi/L}$$

$$\text{b) } 7.05 \text{ pCi/L}$$

P6.1. Una oficina de 150 m^3 tiene el siguiente sistema de recirculación de aire: Del exterior entra un caudal de aire Q_1 debido a ventilación natural. También entra un caudal Q_3 de ventilación forzada, pasando previamente por un filtro que recoge el 95% en masa de las partículas. Un caudal Q_2 corresponde a recirculación y filtra con una eficiencia de recogida del 90%. La concentración en masa de partículas en el exterior es c_0 . 1) En este primer caso, no se recircula aire ($Q_2=0$). El aporte de aire exterior debido a ventilación natural es de 30 L/s , el de aire filtrado es de 60 L/s . Calcular el nivel de concentración en la oficina en función del nivel exterior. 2) Misma pregunta que la anterior, pero esta vez el caudal de aire filtrado se establece de manera que el aire se renueve 8 veces por hora (debido al caudal Q_1+Q_3).

3) Misma pregunta que en el caso 1, pero esta vez se recircula aire de manera que el aire se renueve 8 veces por hora (debido al caudal $Q_1+Q_2+Q_3$).

No hay ni creación ni destrucción de contaminante en el interior (se desprecia, por ejemplo, el hecho de que algunas partículas se depositan). El balance de materia en estos casos es (Preguntas 1 y 2):

$$Q_1 c_0 + Q_3 c_0 (1 - F_3) = Q_4 c_i = (Q_1 + Q_3) c_i$$

$$\text{donde } F_3 = 0.95$$

$$c_i = c_0 \frac{Q_1 + Q_3(1 - F_3)}{Q_1 + Q_3} = c_0 \frac{30 + 60(1 - 0.95)}{30 + 60} = 0.367 c_0$$

8 intercambios por hora significa que el aire permanece en promedio un octavo de hora en la oficina:

$$t = \frac{V}{Q} = \frac{1}{8} \text{ h} \quad \Rightarrow Q = 8 \times 150 = 1200 \text{ m}^3/\text{h} = 333 \text{ L/s}$$

$$c_i = c_0 \frac{30 + 303(1 - 0.95)}{333} = 0.136 c_0$$

En la pregunta 3 (En el lado izquierdo de la ecuación, conc. de contaminante que *entra* por unidad de tiempo, en el derecho, la que *sale*

$$Q_1 c_0 + Q_3 c_0 (1 - F_3) + Q_2 c_i (1 - F_2) = (Q_1 + Q_2 + Q_3) c_i$$

$$c_i = c_0 \frac{Q_1 + Q_3(1 - F_3)}{Q_1 + Q_2 F_2 + Q_3} = c_0 \frac{30 + 60(1 - 0.95)}{30 + 243 \times 0.9 + 60} = 0.107 c_0$$

Las opciones 2 y 3 conducen a una calidad del aire mucho mejor que la opción 1 en cuestión de partículas. La opción 3, al recircular el aire, evita pérdidas importantes de calefacción/refrigeración de la oficina.

P6.2. Repetir el problema de los niveles de radiactividad del tema 6 teniendo en cuenta la pérdida de radiactividad por desintegración. En este caso, considerar que el radón tiene un tiempo de vida media de $t_{1/2} = 3.8$ días, con lo cual se destruye contaminante al ritmo de $c_i/t_{1/2}$.

$$R = \frac{V c_i}{t_{1/2}} = \frac{250000 \times c_i}{3.8 \times 24 \times 3600} = 0.761 c_i \text{ pCi/s}$$

$$c_i = c_0 + \frac{S - R}{Q}$$

$$c_i = c_0 + \frac{S - 0.761 c_i}{Q}$$

$$c_i (Q + 0.761) = Q c_0 + S$$

$$c_i = \frac{Q c_0 + S}{Q + 0.761}$$

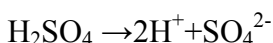
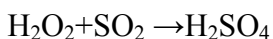
$$(a) Q = 250 \text{ m}^3/\text{h} \quad c_i = 1.59 \text{ pCi/L}$$

$$(b) Q = 25 \text{ m}^3/\text{h} \quad c_i = 6.35 \text{ pCi/L}$$

Conclusión: el error en sitios bien ventilados es despreciable; en cambio, cuando los intercambios de aire son pocos, despreciar la pérdida de radiación por desintegración introduce un error en el resultado (en nuestro caso es del 10%).

T7.1. Para la determinación de SO₂ se hace circular aire por una disolución que contiene H₂O₂ y que oxida el SO₂ a H₂SO₄. El flujo de aire se ajusta a 10 L/min y la captación se realiza durante 20 h en 100 mL de disolución. Al final del muestreo el pH de la disolución es 2.12. Calcular la concentración de SO₂ en aire en mg/m³ y en ppmv

Reacción química de captación:

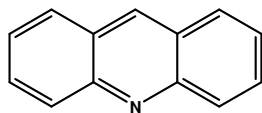


Suponiendo la completa disociación del ácido sulfúrico, a partir del pH tenemos que $[\text{H}^+] = 7.6 \cdot 10^{-3}$ mol/L. Como el ácido sulfúrico es un ácido fuerte (podemos despreciar la desprotonación del disolvente) diprótico, la concentración equivalente de SO₂ será la mitad que la de protones, es decir, $[\text{SO}_2] = 3.8 \cdot 10^{-3}$ moles/L. Sabiendo que la masa molecular del SO₂ es de 64 g/mol y que la disolución es de 100 mL, tenemos que se han retenido 24.32 mg SO₂. Como la cantidad de aire ha sido de 12000 L = 12 m³, $[\text{SO}_2] = 2.03$ mg/m³. Para hallar las ppmv, determinamos el volumen que ocupan los $3.8 \cdot 10^{-3}$ moles de SO₂ (en L), dividimos por el volumen de aire y multiplicamos por un factor 10⁶, resultando 0.77 ppmv.

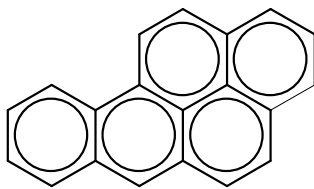
T7.2. Un muestreador de alto volumen capta partículas durante 24h con un flujo de 1.4 m³/min. El área del filtro expuesto al aire mide 18.0 × 23.5 cm². Se corta una tira de 5.0 × 18.0 cm² y se encuentra que contiene 6.5 mg de sulfato. Calcular la concentración de sulfato en aire en µg/m³.

El aire que ha pasado por el filtro es 2016 m³. Si en 90 cm² se han retenido 6.5 mg de sulfato, en el filtro de 423 cm² habrá 30.55 mg = 30550 µg de sulfato, que en los 2016 m³ son 15.2 µg/m³.

T7.3. Se capta una muestra de partículas en aire en un filtro con un flujo de 30 L/min durante 7 horas. El filtro pesa inicialmente 27.9257 g y después de la captación su peso es 27.9550 g. Los HAP se extraen en 50 mL de acetona en un soxhlet durante varias horas. El líquido resultante se enrasa a 200 mL con acetona. La disolución resultante se analiza por HPLC. Se detectan dos picos, A y B, a 360 nm por UV-Vis. Las áreas bajo los picos son A_A = 0.595 y A_B = 0.571. Por espectrometría de masas posterior se encuentra que A es acridina y B es benzopireno. Se obtienen rectas de calibrado para ambos compuestos, A_{ACRIDINA} = 4.74 × 10⁻³ C - 2 × 10⁻³ y A_{BENZOPIRENO} = 2.57 × 10⁻³ C - 0.238, donde C es la concentración en ppb en las disoluciones patrón. Calcular las concentraciones de benzopireno y acridina en aire, en ppb, y en % en peso en partículas.



acridina



benzopireno

La concentración de cada HAP en ppb en la disolución se puede determinar directamente a través de las rectas de calibrado, teniendo 126 ppb de acridina y 315 ppb de benzopireno. En los 200 mL de acetona tendremos 25.2 μg de acridina y 63 μg de benzopireno.

La cantidad de aire que circula es de 12600 L, por lo que podemos determinar los $\mu\text{g}/\text{m}^3$ en aire sin más que dividir las masas por el volumen de aire en m^3 , teniendo 2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ de acridina y 5 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ de benzopireno. A través de la masa de las partículas en el filtro (29.3 mg), se calcula el % resultando 0.086 % de acridina y 0.22 % de benzopireno. Para obtener los ppbv, se calcula los moles de acridina y de benzopireno a partir de los pesos moleculares que se pueden obtener a partir de la figura: P.M. (Acridina= C_{13}NH_9)=179 g/mol, P.M.(Bzp)=252 g/mol

$$[Acr] = \frac{25.2 \times 10^{-6} / 179}{12600 / 24.5} \times 10^9 = 0.27 \text{ ppbv}$$

$$[Bzp] = 0.49 \text{ ppbv}$$

P7.1- Se recoge una muestra de partículas atmosféricas con un filtro conectado a una bomba de vacío. El flujo a través del filtro es 27 L/min y la muestra se recoge durante 8 h. Inicialmente, el peso del filtro seco es 23.3082 g y al final de la captación el peso del filtro en las mismas condiciones es 23.3203 g. El filtro se disuelve en ácido y se realiza un análisis de plomo por espectroscopia de absorción atómica. El ácido del filtro se transfiere cuantitativamente a un frasco de 50 mL y se enrasa. Se prepara un estándar por dilución de 1.50 mL de una disolución de 200 ppm de Pb a 250 mL. La absorción atómica muestra que la absorbancia del estándar es 0.234 y que la de la muestra es 0.112. Calcular la cantidad de plomo en el aire en $\mu\text{g}/\text{m}^3$, en ppbv, y el contenido en plomo de las partículas en %. Dato: Pm(Pb)=207 g/mol

El peso de las partículas en el filtro es de 12.1 mg. Por otra parte, la concentración del estándar será, a partir de la ley de las diluciones, de 1.2 ppm. Tratándose de una disolución, esto son 1.2 mg/L. Sin tener la recta de calibrado, como la absorbancia es proporcional a la concentración (ley de Beer), estimamos que la absorbancia problema (0.112) corresponde a 0.57 ppm Pb, que en 50 mL son 0.029 mg.

Calculamos el volumen de aire que ha pasado por el filtro, que es 12960 L. A partir de este dato podemos calcular los $\mu\text{g}/\text{m}^3$ de Pb sin más que dividir los μg de Pb

entre el volumen de aire en m^3 , resultando $2.24 \mu\text{g}/\text{m}^3$. El % de Pb se obtiene conocido el dato de peso total de las partículas, y se obtiene 0.24 % de Pb. Los ppbv de plomo se obtienen:

$$n = \frac{29 \times 10^{-6}}{207} = 1.4 \times 10^{-7} \text{ mol en la muestra}$$

$$n_{\text{aire}} = \frac{PV}{RT} = \frac{1 \times 12960}{0.082 \times 298} = 530.4 \text{ mol}$$

$$\text{ppbv}_{\text{Pb}} = \frac{n}{n_{\text{aire}}} \times 10^9 = 0.264 \text{ ppbv}$$

T8.1: El análisis de una muestra de aire de la que se ignora su contenido en NO_x se efectúa por el método de la quimiluminiscencia. Haciendo pasar un flujo de aire de 500 ml/min. directamente a la cámara de reacción se obtiene una lectura en el detector de $321 \text{ mW}/\text{m}^2$. Cuando el flujo de aire se hace previamente pasar por el convertidor catalítico la lectura que se obtiene es $958 \text{ mW}/\text{m}^2$. Con el objetivo de obtener la concentración de NO_x en aire se utiliza un patrón de NO de $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$. El paso directo del patrón a la cámara de reacción con un flujo de 500 ml/min satura la señal, por lo que se opta por diluirlo con aire sintético. Se prueban con distintas relaciones de flujo en ml/min. Los resultados son:

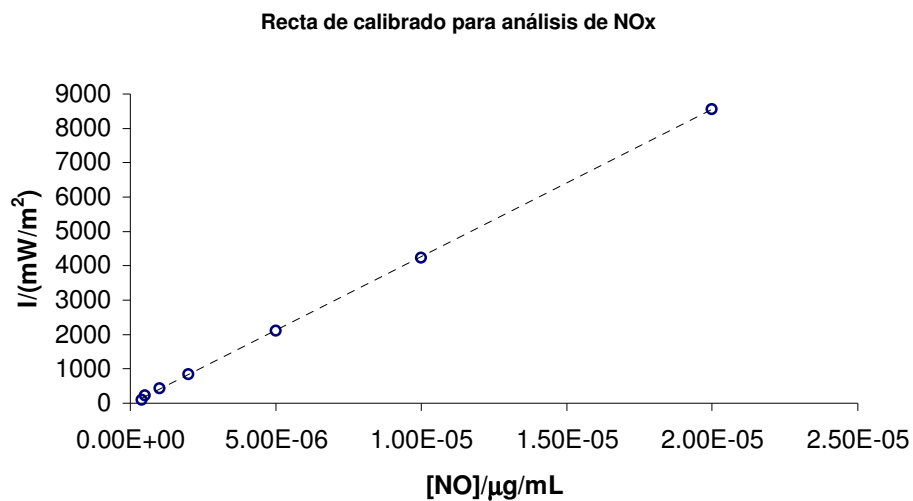
Patrón (mL/min)	Aire sintético (mL/min)	Señal (mW/m^2)
100	400	8560
50	450	4232
25	475	2105
10	490	838
5	495	428
2.5	497.5	231
1	499	88

¿Cuál es la concentración de NO y NO_2 en aire?

Calculamos la concentración de NO para cada dilución del patrón y hacemos una recta de calibrado que represente la intensidad de quimiluminiscencia frente a la concentración de NO. Para calcular la concentración de patrón tomamos como base de cálculo 1 min. Multiplicamos el volumen de patrón en la mezcla con aire sintético en mL por su concentración en $\mu\text{g}/\text{mL}$ y dividimos por el volumen total (500 mL), obteniendo los siguientes resultados:

Patrón (mL/min)	Concentración (10^{-5} $\mu\text{g/mL}$)	Señal (mW/m^2)
100	2	8560
50	1	4232
25	0.5	2105
10	0.2	838
5	0.1	428
2.5	0.05	231
1	0.04	88

La recta que se obtiene es la siguiente:



La ecuación de la recta es $I=4.27 \cdot 10^8 [\text{NO}]-7.6$.

Cuando el flujo pasa directamente a la cámara, la intensidad es proporcional a la concentración de NO. Sustituyendo en la ecuación correspondiente el valor de 321 mW/m^2 tenemos que $[\text{NO}]=7.7 \cdot 10^{-7} \mu\text{g/mL}=0.77 \mu\text{g/m}^3$.

Cuando lo hacemos pasar por el convertidor catalítico, medimos los NO_x totales, con lo que sustituyendo el valor del detector tenemos $[\text{NO}_x]=2.26 \mu\text{g/m}^3$, y entonces $[\text{NO}_2]=[\text{NO}_x]-[\text{NO}]=1.49 \mu\text{g/m}^3$.

T8.2: Se está probando un nuevo adsorbente para el muestreo de benceno en aire ambiente. Dos mL de un patrón de 10 mL/m^3 se hacen pasar por una trampa que contiene dicho adsorbente. Diez litros de aire limpio se hacen fluir por la trampa después del patrón. Posteriormente el benceno se desorbe y se determina por C.G. Por comparación del área del pico cromatográfico del benceno con el de un patrón, se comprueba que se recupera el 60% del benceno. Al repetir el experimento con 6 L de aire se recupera el 98% ¿Qué límites de volumen de escape podemos deducir de esta experiencia?

El benceno total que está entrando en la trampa es de 20 nL. Es fácil ver que la cantidad de benceno que queda retenida en cada experimento es de 12 nL para la elución con 10 L y 19.6 nL para la elución con 6 L. por tanto, los límites del volumen de escape serán 6 y 10 L: en el primer caso, se adsorbe casi todo el benceno (nunca se adsorbe un 100 %); mientras que en el segundo caso aún queda mucho por adsorber.

T8.3: Queremos analizar los siguientes COV en aire a $20 \text{ }^\circ\text{C}$: pentano, hexano, hexanol y pentanol.

- a) ¿Puede realizarse la captación con una trampa adsorbente de carbotrap?
- b) si no fuera así ¿podríamos captar eficientemente estos compuestos a alguna otra temperatura con el mismo adsorbente?
- c) En caso de que pueda realizarse la captación, ¿a qué temperatura deberíamos realizar la desorción para análisis por CG?

Dato: Volumen de escape en L/g de adsorbente.

Temperature	0	20	40	60	80	100	120	140	160	180	200	220	240	260	280	300	320
Methane	0.015	0.009	0.005	0.003	0.002	0.001											
Ethane	0.028	0.017	0.009	0.005	0.003	0.002	0.001										
Propane	0.12	0.07	0.04	0.023	0.012	0.007	0.004	0.003	0.002	0.001	0.001						
Butane	0.8	0.42	0.22	0.13	0.075	0.04	0.021	0.012	0.007	0.005	0.003	0.002	0.001				
Pentane	13.0	5.89	2.5	1.2	0.5	0.22	0.11	0.06	0.03	0.017	0.009	0.005	0.003	0.002	0.001		
Hexane	200	79.9	30.0	12.0	5	2	0.776	0.322	0.138	0.062	0.03	0.02	0.01	0.007	0.004	0.003	0.002
Heptane	1,200	450	180	70.0	30.0	110	40.0	14.0	5	2	0.7	0.33	0.13	0.07	0.04	0.02	0.01
Octane	22,000	7,500	2,500	900	330	110	380	120	42.0	17.0	6	2	0.59	0.23	0.12	0.06	0.03
Nonane	220,000	70,000	25,000	9,000	3,000	1,000	380	120	600	200	40.0	12.0	4.1	1.3	0.5	0.19	0.09
Decane	3M	1M	330,000	112,000	40,000	13,000	5,000	1,700	600	200	600	200	65.0	20.0	6.5	2.5	0.8
Undecane	9M	3M	1M	300,000	100,000	30,000	12,500	5,000	1,400	600	200	600	200	65.0	20.0	6.5	2.5
Dodecane	23M	8M	3M	1M	330,000	110,000	40,000	15,000	5,000	1,700	600	200	70.0	24.0	8	3	0.86

Temperature	0	20	40	60	80	100	120	140	160	180	200	220	240	260	280	300	320
Methanol	0.600	0.250	0.110	0.050	0.020	0.010	0.006	0.004	0.002	0.001	0.001						
Ethanol	1.20	0.550	0.250	0.110	0.050	0.025	0.012	0.007	0.004	0.003	0.002	0.001					
1-Propanol	8.00	3.20	1.40	0.600	0.240	0.103	0.049	0.023	0.012	0.007	0.004	0.003	0.002	0.001			
1-Butanol	80.0	30.0	11.0	4.50	1.80	0.675	0.300	0.120	0.053	0.024	0.014	0.009	0.006	0.004	0.003	0.002	0.001
1-Pentanol	230	100	40.0	17.0	7.00	2.50	1.10	0.500	0.190	0.087	0.043	0.022	0.014	0.009	0.006	0.004	0.003
Hexanol	650	300	120	50.0	23.0	10.0	4.00	1.70	0.700	0.350	0.180	0.079	0.046	0.023	0.014	0.009	0.007
Heptanol	2,000	900	400	200	80.0	36.0	17.0	8.00	3.50	1.70	0.750	0.350	0.16	0.080	0.039	0.024	0.014
Octanol	7,000	3,000	1,500	700	300	140	60.0	27.0	12.0	6.00	2.70	1.30	0.600	0.250	0.123	0.070	0.040
Nonanol	33,000	15,000	6,500	3,000	1,200	600	250	100	45.0	20.0	9.00	4.00	1.80	0.860	0.400	0.190	0.094
Decanol	66,000	30,000	13,000	6,000	2,500	1,200	500	200	90.0	40.0	18.0	8.00	3.20	1.80	0.900	0.400	0.200

a) Según las tablas, los volúmenes de escape de hexano, pentanol y hexanol son superiores a 10 L/g, lo que indica que la adsorción es factible en la práctica. Sin embargo, para pentano es de 5.89 L/g, con lo cual no se puede utilizar Carbotrap a 20°C para este conjunto de compuestos.

b) Sin embargo, a 0°C, el volumen de escape es superior a 10 L/g, con lo cual la adsorción si se puede llevar a cabo.

c) Las temperaturas de desorción son: heptano: a partir de 200°C, hexano: 260°C, pentanol: 260°C, hexanol: 300°C. De modo que a partir de 300°C, se puede desorber cualquier de estos compuestos.

P8.1- Se utiliza una trampa de Tenax para recoger benceno del aire ambiente. La captación se realiza durante 1 hora 20 mn con una velocidad de flujo de 0.1 L/min. Se sella la trampa y se lleva al laboratorio para analizarla por CG con desorción térmica. El pico correspondiente al benceno tiene un área de 38.3. Posteriormente se preparan patrones introduciendo 1 µL y 2 µL de benceno en trampas análogas. Se repite el mismo programa de desorción térmica y cromatográfico y las áreas obtenidas son 23.5 y 47.2 respectivamente para los patrones. Calcular la concentración de benceno en aire en ppmv. Dato: $\rho_{\text{benc}}=0.88 \text{ g/mL}$

A partir de los datos de los patrones podemos plantear un sistema de ecuaciones para determinar la ecuación de la recta de calibrado.

$$23.5 = a + b$$

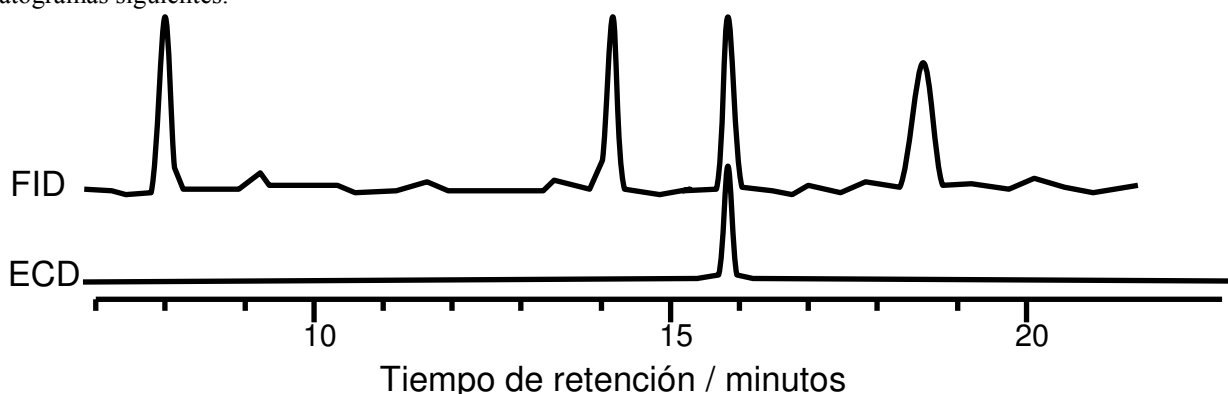
$$47.2 = 2a + b$$

La solución es $A=23.7 V-0.2$,

donde V se expresa en µL.

Resolviendo para el área problema obtenemos 1.62 µL C₆H₆. Como el benceno de los patrones es líquido, estos µL son, sabiendo que la densidad del benceno es 0.879 kg/L y su peso molecular 78 g/mol, $1.83 \cdot 10^{-5}$ moles. Usando la ecuación de los gases ideales, el volumen ocupado en las condiciones del muestreo ($P=1\text{atm}$, 25°C), son 447 µL. Dividiendo por los 8 L de aire que han entrado en la trampa y multiplicando por 10^6 son 55900 ppmv.

P8.2- Se ha determinado que una muestra de aire contiene benceno, tolueno, xileno y tetracloroetileno. Se utiliza una columna capilar de dimetil-silicona para separarlos y detectores FID y ECD. Teniendo en cuenta que el detector FID es muy sensible a los hidrocarburos y a la mayoría de los compuestos orgánicos, pero no detecta los compuestos inorgánicos como N₂, O₂, H₂O e incluso CO y CO₂; sabiendo además que el detector ECD no detecta hidrocarburos, ni alcoholes, ni cetonas, pero es sensible a moléculas que contienen halógenos, grupos nitro y organometálicos; Realizar la asignación de los picos en los cromatogramas siguientes.



En un detector de captura electrónica ECD, únicamente podemos observar los compuestos halogenados. Por ello, el pico que únicamente aparece en el cromatograma ECD corresponde al tetracloroetileno.

La columna (dimetil-silicona) siendo apolar, el resto de los analitos debe tener un tiempo de retención que dependerá de sus pesos moleculares y sus características dipolares. Benceno (C_6H_6), tolueno ($C_6H_5CH_3$), y xilenos ($C_6H_4(CH_3)_2$) son hidrocarburos, son todos muy apolares, la separación entre estos compuestos depende fundamentalmente de los pesos moleculares. Primero saldrá el benceno, después tolueno y como último xileno.

T9.1: El gas natural está formado casi exclusivamente por metano. ¿Cuánto CO_2 se produciría por la combustión completa de un metro cúbico de gas a $T=298\text{ K}$ y $P=1\text{ atm}$? Dar el resultado en kilogramos y en metros cúbicos (en las mismas condiciones) de CO_2 .

Como la reacción de combustión de metano para dar oxígeno es de estequiometría 1:1, se producirían 1 m^3 de CO_2 . Como un mol de gas ideal ocupa 22.4 L en c.n., 1 m^3 serán 44.6 moles de CO_2 que son 1.964 Kg (1964 g).

T9.2: La composición elemental del hueso de aceituna es (% en masa):

C	47,5	H	6,3
N	0,2	O	46

Una caldera consume 1000 kg de hueso de aceituna al día. ¿Cuántos Nm^3 de CO_2 produce diariamente? (“ Nm^3 ”: se define como metros cúbicos en las condiciones de $T=0^\circ C$ y $P=1\text{ atm}$)

1000 kg de hueso de aceituna contienen átomos de carbono por un peso total de 475 kg . Esto representa: $475000\text{ g}/(12\text{ g/mol})=39580\text{ mol}$ de C

Suponemos que la totalidad del C se quema y forma CO_2 . Formará tantos moles de CO_2 como había moles de C. Esto corresponde a un volumen en condiciones normales de $39580*22.4/1000=886.7\text{ Nm}^3$ de CO_2 .

T9.3: Suponer que los gases de salida de un tubo de escape tienen una composición molar inicial de 18% de CO_2 , 3.3% de O_2 y 78.7% de diluyente (preferentemente N_2 y agua). Los gases se emiten a una temperatura de 1600 K . Determinar la concentración de equilibrio de CO en microgramos por metro cúbico a una presión ambiente de una atmósfera

Dato: constante de equilibrio de descomposición de CO_2 a 1600 K , $K_p=1.98 \times 10^{-5}$

Podemos calcular la presión parcial de cada componente a partir del dato de presión total y composiciones molares.

$$P_{CO_2}=0.18 \text{ atm}$$

$$P_{O_2}=0.033 \text{ atm}$$

La constante de equilibrio de la descomposición de CO_2 corresponde a la reacción:



Considerando que las presiones parciales no cambian significativamente con la formación de CO (buena aproximación siempre que $K_p \ll 1$):

$$K_p = \frac{P_{CO} P_{O_2}^{1/2}}{P_{CO_2}} = \frac{x \cdot 0.033^{1/2}}{0.18} \rightarrow P_{CO} = 1.96 \cdot 10^{-5} \text{ atm}$$

Esto significa que la concentración de CO es, aplicando la ecuación de estado de los gases ideales a $T=1600 \text{ K}$, de $1.48 \cdot 10^{-7}$ moles CO/L, que son $4.15 \cdot 10^3 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

T9.4: Calcular las concentraciones de CO en la combustión en aire de un motor funcionando en dos condiciones, una rica en aire, otra empobrecida en aire. El combustible es octano (C_8H_{18}). En este primer caso, se considera que la relación de equivalencia $\Phi=0.99$

1) Escribir la reacción de la combustión para este valor de Φ , incluyendo al nitrógeno que no reacciona.

2) Calcular la presión parcial de CO en atmósferas y en ppmv.

En las preguntas 3 y 4 se considera el funcionamiento con una relación $\Phi=1.1$.

3) Escribir la reacción de la combustión para este valor de Φ , incluyendo al nitrógeno que no reacciona.

4) Calcular la presión parcial de CO en atmósferas

5) ¿Cuál sería el efecto de un convertidor catalítico en ambos casos?

Datos:

$$\Phi = \frac{(n_{\text{combustible}}/n_{\text{aire}})_{\text{real}}}{(n_{\text{combustible}}/n_{\text{aire}})_{\text{estequiom.}}}$$

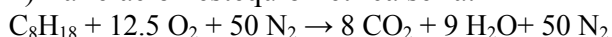
La composición del aire es: 80% N_2 y 20% O_2 .

Se supone que las presiones de salida de los gases son de 1 atmósfera.

Se desprecian los hidrocarburos no quemados

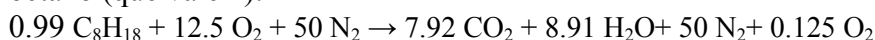
Constante de formación de monóxido de carbono en las condiciones del motor: $K_p=1.98 \cdot 10^{-5}$

1) La relación estequiométrica sería:



donde se ha tenido en cuenta que hay 4 veces más moles de nitrógeno molecular que de oxígeno molecular (dado que hay 20% O_2 , 80% N_2 en el aire)

Una forma de introducir Φ es multiplicándolo por el coeficiente estequiométrico del octano (que vale 1):



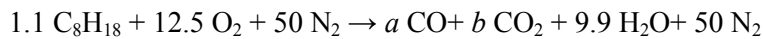
2) Se calcula el número de moles totales de gas generados:
 $7.92+8.91+50+0.125=66.96$ mol por cada 0.99 mol de octano quemado.
 De ahí deducimos las presiones parciales:

$$P_{O_2} = \frac{0.125}{66.96} P_{tot} = 1.86 \times 10^{-3} atm$$

$$P_{CO_2} = \frac{7.92}{66.96} P_{tot} = 0.118 atm$$

$$P_{CO} = \frac{K_P P_{CO_2}}{\sqrt{P_{O_2}}} = 54 \times 10^{-6} atm = 54 ppmv$$

3)



En este caso, O_2 se consume entero, y parte del carbono no se oxida totalmente y queda en forma de CO. Los coeficientes a y b se obtienen equilibrando elemento por elemento:

$$\text{Total C: } a+b=8.8$$

$$\text{Total O: } 2*12.5=a+2b+9.9$$

Resolviendo, se halla:

$$a=2.5$$

$$b=6.3$$

4) La suma de los moles de gas es 68.7 mol.

$$P_{CO} = \frac{2.5}{68.7} P_{tot} = 0.0364 atm = 36400 ppmv$$

5) El convertidor catalítico sólo funciona bien si la relación es estequiométrica. Para $\Phi < 1$, no habría CO suficiente para reducir los NO formados, mientras que en la región rica en combustible, no habría NO suficiente para oxidar el CO.

T9.5: La gasolina contiene un 1% en volumen de benceno. Se supone que la disolución es ideal. ¿Cuál sería la concentración de benceno en miligramos por metro cúbico en una cavidad cerrada en contacto con la gasolina, supuesta formada de octano, a temperatura ambiente (20°C) y presión atmosférica? La temperatura ambiente asciende a 40°C. ¿Cuál sería la nueva concentración de benceno?

DATOS: constantes de Antoine para el benceno (para presión en milímetros de mercurio y temperaturas en grados celsius)

$$A=6.90565$$

$$B=1211.033$$

$$C=220.790$$

$$\text{Densidad benceno: } 0.88 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{Densidad octano: } 0.7 \text{ g/cm}^3$$

Con la ecuación de Antoine obtenemos una presión de vapor de benceno p^0 a 20 °C de 75.2 mmHg, que corresponden a 0.098 atm (sabiendo que 760 mmHg equivalen a 1 atm).

Para poder aplicar la ley de Raoult, se necesita la fracción molar de benceno en la mezcla líquida (gasolina).

Se considera por ejemplo un volumen de 1000 cm³. Esta constituido por 990 cm³ de octano y 10 cm³ de benceno. Conociendo la densidad, las masas de octano y benceno son 693 g y 8.8 g respectivamente. El número de moles totales es:

$$n = \frac{693}{114} + \frac{8.8}{78} = 6.079 + 0.113 = 6.19 \text{ mol}$$

$$x_{benc} = \frac{0.113}{6.19} = 0.0182$$

Aplicando la ley de Raoult, se obtiene:

$$P_{benc} = x_{benc} \pi = 0.0182 \times 0.098 = 1.80 \times 10^{-3} \text{ atm}$$

Con la ecuación de estado de los gases ideales, esto son $75 \cdot 10^{-6}$ mol/L = $5850 \cdot \text{mg/m}^3$.

NOTA: Comentar este valor.

Operando igualmente para una temperatura de 40 °C, obtenemos:

$$13300 \text{ mg/m}^3.$$

T9.6: Estimar el tiempo requerido para destruir el 99.9% del benceno en un desecho gaseoso a 500 °C, 600 °C y 800 °C asumiendo una cinética de primer orden.

DATO: Energía de activación de la oxidación de Benceno: prefactor $A=7.43 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$ Energía de activación: 95.9 Kcal/mol

Suponemos una reacción de oxidación de benceno de primer orden:

benceno \rightarrow productos de descomposición ($\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$)

La velocidad de descomposición es:

$$v = -\frac{dC_{benc}}{dt} = kC_{benc}$$

La resolución de esta ecuación conduce a:

$$\ln \frac{C_{benc}}{C_{0,benc}} = -kt,$$

donde C_{benc} es la concentración final y $C_{0,benc}$ la concentración inicial.

NOTA: Un caso particular de esta fórmula permite calcular el tiempo de vida media,

$$C_{benc} = 50\% \text{ de } C_{0,benc} \Rightarrow \ln(2) = kt$$

Según la fórmula de Arrhenius, la constante de velocidad k se expresa como:

$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right).$$

Con un poco de álgebra, el tiempo necesario para que un compuesto llegue a una concentración C es:

$$t = \frac{1}{A} \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \ln \frac{C_{0,benc}}{C_{benc}}$$

Como queremos que del 100 (%) quede 0.1, es decir la milésima parte de la concentración inicial, no hay más que sustituir los valores de factor preexponencial ($7.43 \cdot 10^{21} \text{ s}^{-1}$) y energía de activación (95.2 Kcal/mol) para el benceno con las unidades apropiadas y las temperaturas, resultando:

Para 500 °C; 13.6 días.

Para 600 °C; 15 min. 24 s

Para 800 °C; 31 ms.

T9.7: Un carbón activo tiene una superficie efectiva de 1200 m²/gr. Se ha experimentado con un dispositivo adsorbente de este material para la eliminación de tolueno. Se comprueba que a 20°C se adsorbe un máximo de 18.6 Kg de tolueno por kilogramo de adsorbente.

- ¿Cuál es el tamaño del centro activo del carbón activado con respecto a la adsorción de tolueno?
- Se hace pasar 1 m³ de aire conteniendo 275 ppmv de tolueno a través de un kilogramo de adsorbente a una temperatura de trabajo de 20°C . Suponiendo que se alcanza el equilibrio a esa temperatura entre tolueno gaseoso y adsorbido, ¿cuál sería la composición en ppmv del aire de salida?

DATO: K (Langmuir, tolueno sobre carbon activo) = 0.0657 atm^{-1})

a) El tamaño del centro activo es la superficie de carbono que adsorbe una molécula de adsorbato. Según los datos, cada gramo adsorbe 18.6 g de tolueno (C_7H_8). Como ese gramo tiene una superficie activa de 1200 m^2 y éste tiene una masa molecular de 92 g/mol, por una sencilla regla de tres cada molécula ocupará $9.86 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$ de la superficie activa del carbono.

b) La fracción molar (o presión parcial en este caso en el que la presión total es de 1 atm) de tolueno será $275 \cdot 10^{-6} \text{ atm}$. El número de moles iniciales de tolueno será, aplicando la ecuación de los gases ideales:

$n_{A,0} = 0.0114 \text{ mol}$. El número de moles de sites (=número máximo de moles de tolueno) es $n_T = 18600/92 = 202 \text{ mol}$:

El grado de recubrimiento:

$$\theta = \frac{KP_A}{1 + KP_A} = \frac{[SA]}{[S] + [SA]} = \frac{n_{SA}}{n_T} \quad (1)$$

La conservación de materia del tolueno implica que hay tolueno libre en aire y tolueno fijado en los sites del adsorbente:

$$n_{A,0} = n_A + n_{SA} \quad (2)$$

Esta última ecuación se puede reescribir, incorporando la primera:

$$n_A = n_{A,0} - \theta n_T \quad (3)$$

Observando que $KP_A < 0.0657 * 275 \times 10^{-6} \ll 1$,

$$(1) \rightarrow \theta \approx KP_A \quad (4)$$

combinando (3) y (4)

$$n_A = n_{A,0} - n_T KP_A \quad (5)$$

Aplicando la ley de gases ideales al tolueno gaseoso e incorporandolo en (5):

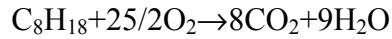
$$\frac{P_A V}{RT} = n_{A,0} - n_T KP_A \quad (6)$$

Se puede ahora despejar P_A

$$P_A = \frac{n_{A,0}}{\frac{V}{RT} + n_T K} = \frac{0.0114}{41.62 + 13.27} = 208 \times 10^{-6} \text{ atm}$$

El aire entra con 275 ppmv de tolueno y sale con 208 ppmv.

P9.1- Escribir la reacción de combustión del octano (uno de los componentes principales de las gasolinas) y dar el número de metros cúbicos normalizados (“Nm³”: se define como metros cúbicos en las condiciones de T=0°C y P=1 atm) de CO₂ que se formarían a partir de 50 litros de gasolina supuesta ésta formada únicamente por octano. Densidad del octano: 0.8 gr/cc.



Teniendo en cuenta la densidad del octano, obtenemos 40000 g de octano en 50 L. Estos 40000 g son (dividiendo por la masa molecular, 114 g/mol) 350.9 moles.

Como la estequiometría es 1:8, a partir de 50 L de octano se formarían 2807 moles de CO₂ que, en c.n., son 62.88 Nm³ CO₂.

P9.2- Determinar la variación de entalpía y de entropía de la reacción de descomposición del CO₂ a partir de los datos de constante de equilibrio de la tabla adjunta:

T/K	1000	1200	1400	1600	1800	2000
lnK _p	-23.529	-17.871	-13.842	-10.830	-8.497	-6.635

Se recordarán las relaciones entre variables termodinámicas aprendidas en "Bases física y químicas del medioambiente":

$$K_p = \exp(-\Delta G/RT)$$

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

También se recuerda que ΔH y ΔS apenas varían con la temperatura.

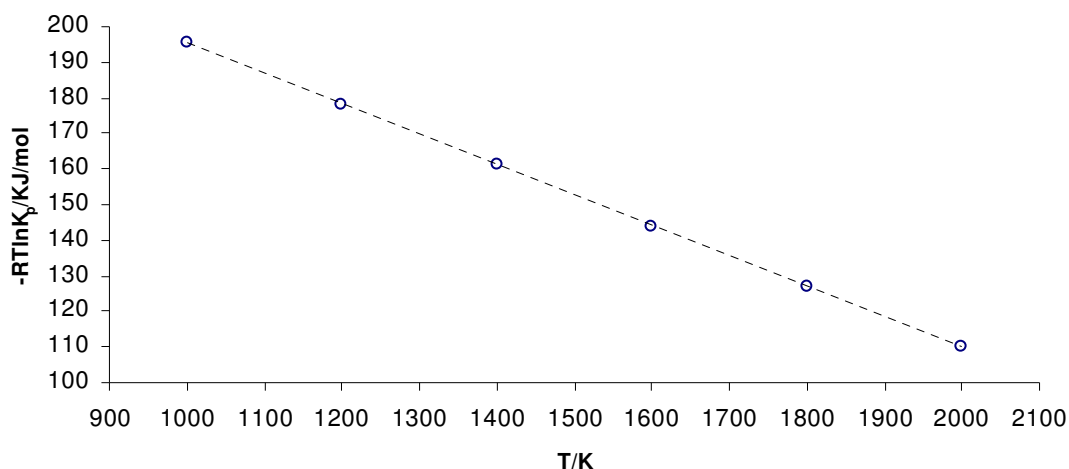
Pista: en base a las relaciones termodinámicas se tendrá que buscar una relación lineal entre las variables para realizar una regresión.

$$K_p = e^{-\Delta G/RT} \Leftrightarrow -RT \ln K_p = \Delta G$$

$$-RT \ln K_p = \Delta H - T\Delta S$$

La representación de -RTlnK_p frente a T dará una recta de pendiente -ΔS⁰ y ordenada en el origen ΔH⁰:

Cálculo de ΔH^0 y ΔS^0



A partir de la pendiente de la recta y la ordenada en el origen se obtiene $\Delta S^0=0.0856 \text{ KJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ y $\Delta H^0=281.19 \text{ KJ/mol}$.

P9.3- La composición típica de los gases de escape de un motor de combustión son 3.3 % de O_2 y 77% de N_2 . Obtener las composiciones de equilibrio de NO y NO_2 a 1800 K en la mezcla. Constantes de formación de NO y de NO_2 : $K_p (\frac{1}{2}\text{N}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow \text{NO})= 4.71 \exp (-10900/T)$; $K_p (\text{NO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2)= 2.5 \times 10^{-4} \exp (6923/T)$

Aplicamos las ecuaciones correspondientes a los equilibrios de formación de NO térmico:



Las presiones parciales de N_2 y O_2 son 0.77 y 0.033 atm respectivamente. Las constantes de 1800 K valen 0.01104 para el NO y $0.0117 \text{ atm}^{-1/2}$ para el NO_2 . De los equilibrios anteriores se obtiene:

$$P_{\text{NO}} = K_{P,\text{NO}} \sqrt{P_{\text{O}_2} P_{\text{N}_2}}$$

$$P_{\text{NO}_2} = K_{P,\text{NO}_2} P_{\text{NO}} \sqrt{P_{\text{O}_2}}$$

Sustituyendo los datos resulta $1.76 \cdot 10^{-3} \text{ atm}$ de NO y $3.74 \cdot 10^{-6} \text{ atm}$ de NO_2 .

Conclusión: La presión parcial de NO es alta a altas temperaturas, mucho más alta que la de NO₂. NO es el contaminante primario que se forma en las reacciones de combustión. A bajas temperaturas, los equilibrios se desplazan: NO se convierte lentamente en NO₂. NO₂ es el contaminante secundario.

P9.4- Las velocidades de evaporación de los hidrocarburos líquidos, desde superficies horizontales, se pueden estimar en base a la fórmula:

$$v = 0.5 \frac{P}{P}$$

donde V es la velocidad de evaporación en mol m⁻²s⁻¹, p es la presión de vapor del líquido y P la presión atmosférica.

Estimar cuánto tardaría en evaporarse

- una película de 1mm de unos residuos de fioul pesado en la playa (chapapote)
- una película de 1mm de gasolina.

Datos: $\rho_{\text{fioul}} = 1 \text{ g/cm}^3$; P.M.(fioul)=400 g/mol; $\pi(\text{fioul}) = 10^{-7} \text{ torr}$ a 20°C
 $\rho_{\text{gasolina}} = 0.74 \text{ g/cm}^3$; P.M.(gasolina)=95 g/mol; $\pi(\text{gasolina}) = 48 \text{ kPa}$ a 20°C

R:Cuidado, no confundir la velocidad de evaporación con el volumen, dado que ambos se podrían expresar fácilmente con el mismo símbolo V .

Para un área A en m², el volumen a evaporar es:

$$Vol = A \times 10^{-3}$$

moles contenidos en este volumen:

$$n = \frac{\rho Vol}{P.M.}$$

moles evaporados:

$$v = - \frac{1}{A} \frac{dn}{dt}$$

$$n_{\text{evap}} = \int Av dt = Avt$$

Equiparando las dos cantidades molares:

$$t = \frac{10^{-3} \rho}{v P.M.}$$

$$t = \frac{10^{-3} \rho}{P.M.} \frac{P}{0.5\pi}$$

a) $t = 3.8 \times 10^{10} \text{ s} = 1200 \text{ años!!}$

b) $t = 33 \text{ s}$

P9.5- La combustión de hidrocarburos no suele ser nunca completa. En este problema, se va a examinar el caso del benceno en una gasolina. Se asumirá que la composición de la gasolina líquida es del 1% en volumen de benceno y el resto una mezcla de otros compuestos. Se supone que la mezcla de los volúmenes es ideal (no hay volumen de exceso).

a) Calcular los moles de benceno en 1L de gasolina líquida.

b) ¿Qué porcentaje del benceno inicial no se quema? Se supondrá que la oxidación sigue una cinética de primer orden, y que la combustión se efectúa a 850 °C durante 2.5 ms.

c) Se propone un modelo alternativo para explicar el benceno no quemado: hay dos regiones en la cámara de combustión, una de temperatura alta en la que el benceno se quema por completo, y otra, cercana a las paredes frías del cilindro, en la que el benceno no se quema en absoluto. En los gases de la salida, se mide una concentración de benceno de 22 ppmv. Calcular el número de moles de gas que salen del cilindro por cada litro de gasolina.

d) Calcular el volumen de la región fría como % del volumen total.

Suponer que en la combustión, el oxígeno del aire esta presente en condiciones estequiométricas. Se podrán hacer las aproximaciones oportunas.

Datos: Densidad benceno: 0.88 g/cm^3 Densidad mezcla de otros compuestos de la gasolina: 0.7 g/cm^3
 Fórmula empírica de la mezcla de otros compuestos: $C_{7.2}H_{10.7}$
 Se asumirá que el aire esta constituido de una mezcla de 80 % nitrógeno y 20 % oxígeno en volumen.
 Constantes de Arrhenius de combustión del benceno asumiendo una cinética de primer orden: Prefactor $A=7.43 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$; Energía de activación $E=400.9 \text{ kJ/mol}$, $R=8.31 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}=0.082 \text{ atm L mol}^{-1}\text{K}^{-1}$

Solución: Se detalla para cada parte el ejercicio que contiene una técnica de resolución análoga y algunas palabras claves del ejercicio mencionado.

a) 1% en volumen de benceno:

(resolución análoga al ejercicio T9.5: presión de vapor del benceno en aire en una mezcla con gasolina, constantes de Antoine)

Se puede resolver por ejemplo para 1 litro de gasolina:

1litro son 1000 cm^3 , de los cuales el 1% es benceno: $V_{\text{benc}}=10 \text{ cm}^3$ de benceno.

$m_{\text{benc}}=\rho V_{\text{benc}}=8.8 \text{ g}$ de benceno

P.M. (benceno= C_6H_6) = $6 \cdot 12 + 6 \cdot 1 = 78 \text{ g/mol}$

$$n_{\text{benc}} = \frac{m_{\text{benc}}}{P.M.} = \frac{8.8}{78} = 0.113 \text{ mol}$$

b)

(resolución análoga al ejercicio T9.6: cinética de primer orden de oxidación del benceno en un desecho gaseoso)

La constante de velocidad se obtiene mediante la ecuación de Arrhenius:

$$k(850^\circ \text{C}) = A \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) = 7.43 \times 10^{21} \exp\left(-\frac{400900}{8.31 \times (850 + 273)}\right) = 1637 \text{ s}^{-1}$$

La cinética es de primer orden:

$$-\frac{dC}{dt} = kC \quad \frac{dC}{C} = -kdt$$

lo que conduce (tras integrar, o sabiendose el resultado):

$$\ln\left(\frac{C_f}{C_i}\right) = -kt$$

Inciso: Esta fórmula se estudia también en "bases físicas y químicas del

medioambiente" (1º curso) $t = \frac{1}{k} \ln\left(\frac{C_i}{C_f}\right)$

$$\frac{C_f}{C_i} = \exp(-kt) = \exp(-1637 \times 2.5 \times 10^{-3}) = 0.0167$$

$\frac{C_f}{C_i}$ es la fracción de benceno no quemado, el 1.67 %

c)

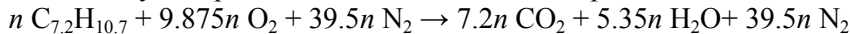
(resolución análoga al ejercicio T9.4: el motor térmico en varios regímenes de combustión)

Para simplificar, supongo que la oxidación de la gasolina es total (no es absurdo, ya que el benceno es mucho más difícil de oxidar que la gasolina, como se ha comentado en el ejercicio T9.6).

Puedo desprejciar el benceno, también para simplificar, ya que sólo representa el 1% en volumen de la mezcla.

Se va a suponer también que el benceno esta distribuido de forma homogénea en la cámara de combustión.

Se escribe la ecuación química, por ejemplo para n moles de gasolina, que incorpora el balance de materia y se equilibra. Para los detalles, ver el problema T9.4:



Para fijar n , se deben hacer los cálculos para 1 litro de gasolina:

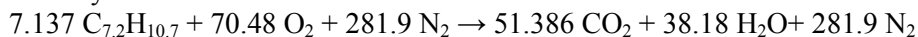
En 1000 cm^3 de gasolina, hay 990 cm^3 de "mezcla de otros compuestos" que tienen una masa de 693 g (teniendo en cuenta su densidad).

El peso molecular medio de las moléculas de "mezcla de otros compuestos" es:

$$P.M. (C_{7.2}H_{10.7}) = 7.2 \cdot 12 + 10.7 \cdot 1 = 97.1 \text{ g/mol}$$

$$n = \frac{m}{P.M.} = \frac{693}{97.1} = 7.137 \text{ mol}$$

Sustituyendo en la ecuación:



El número de moles finales de gas generados (CO_2 , H_2O y N_2 salen en forma de gas) por litro de gasolina es:

$$51.386 + 38.18 + 281.9 = 371.5 \text{ moles de gas.}$$

d) Número de moles de benceno sin quemar en la salida (por litro de gasolina quemada):

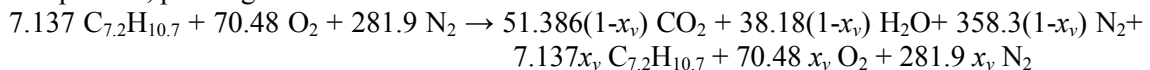
$$n = 22 \times 10^{-6} \times 371.5 = 8.17 \times 10^{-3} \text{ mol}$$

Fracción de benceno sin quemar x_v :

$$x_v = \frac{n_{benc \text{ sin quemar}}}{n} = \frac{8.17 \times 10^{-3}}{0.113} = 0.0723$$

Conclusión: el 7.2% del volumen corresponde a la región fría

NOTA: También se podría haber hecho un cálculo más exacto, asumiendo que la gasolina se quema sólo en la región caliente, al igual que el benceno. Esto hace el cálculo un poco más complicado, pero algo más realista:



En la pregunta c, el número de moles sería entonces: $371.5 - 12 x_v$

$$n = 22 \times 10^{-6} \times (371.5 - 12x_v)$$

$$x_v = \frac{n_{benc \text{ sin quemar}}}{n} = \frac{22 \times 10^{-6} \times (371.5 - 12x_v)}{0.113}$$

Ecuación del primer grado con una incógnita, despejando x_v se obtiene:

$$x_v = 0.072$$

Conclusión: aunque se ha tratado de forma más complicada, ¡el resultado numérico es prácticamente igual!

El motivo es que la mezcla de gases antes de quemarse (la gasolina ya se considera vaporizada) tiene casi el mismo número de moles (359) que los gases quemados (371), con lo cual el volumen apenas varía.

P9.6- El 1,1,1-tricloroetano (también llamado metil-cloroformo) en el aire y en las aguas árticas tiene prácticamente durante todo el año las concentraciones siguientes: 0.93 ng/L en aire y 2.5 ng/L en agua. Las constantes de Henry a 0°C (invierno) y a 10°C (verano) valen 0.154 y 0.0893 mol L⁻¹atm⁻¹ respectivamente. Calcular tanto en invierno como en verano si los flujos de 1,1,1-tricloroetano van de la atmósfera al agua o viceversa. ¿Cuales son los efectos adversos sobre el medio ambiente de una molécula como el 1,1,1-tricloroetano?

Solución: La ley de Henry para la sustancia A (el 1,1,1-tricloroetano) estipula que:

$$[A]_{disolvente} = K_H P_A$$

Llamemos M_w al peso molecular de nuestro contaminante, que podríamos calcular, aunque en realidad no lo necesitaremos.

La presión parcial de A se relaciona con la fracción molar en el gas y la presión total:

$$P_A = y_A P$$

Se puede hacer el cálculo para un determinado volumen, por ejemplo un litro:

La cantidad de contaminante en moles en 1 L de aire es:

$$[A]_{aire} = \frac{C_{A,aire}}{M_w}$$

La cantidad total de moles de gas en 1 L por otra parte es:

$$\frac{n_{total}}{V} = \frac{P}{RT}$$

donde se ha de usar el valor 0.082 para R .

Por tanto,

$$y_A = \frac{[A]_{aire}}{M_w} \frac{RT}{P}$$

El miembro de la izquierda en la ley de Henry es la concentración molar de contaminante. Se relaciona evidentemente con la concentración másica $C_{A,agua}$ dividiendo por el peso molecular:

$$[A]_{agua} = \frac{C_{A,agua}}{M_w}$$

Reuniendo las distintas expresiones, se obtiene:

$$C_{A,agua} = K_H R T C_{A,aire}$$

$$\text{A } 0^\circ\text{C: } C_{A,agua} = 3.2 \text{ ng/L}$$

$$\text{A } 10^\circ\text{C: } C_{A,agua} = 1.93 \text{ ng/L}$$

El valor de equilibrio termodinámico a 0°C esta por encima de la concentración en las aguas (de 2.5 ng/L), por lo que el flujo de este contaminante en invierno esta dirigido de la atmósfera a las aguas (se empobrece la atmósfera, se enriquece el agua), mientras que en verano, pasa lo contrario, las aguas liberan contaminante a la atmósfera.

Esta sustancia es un CFC cuyo principal efecto pernicioso sobre el medioambiente es la destrucción de la capa de ozono.

T10.1.- Calcular la velocidad terminal de una partícula de 1 μm de diámetro en un separador centrífugo con $v_c=18$ m/s. Datos: viscosidad del aire a 20 °C: 0.018 cP, densidad de las partículas: 2 g /cm³.

Aplicando la ecuación (3) se obtiene directamente:

$$v_t = \frac{v_c^2 d^2 \rho}{18\eta R} = \frac{18 \times (10^{-6})^2 \times 2000 (\text{kg} / \text{m}^3)}{1.8 \times 10^{-5}} = 2 \times 10^{-3} / R \text{ m/s (para } R \text{ en m)}$$

1 poise es la unidad de viscosidad CGS, es decir que equivale a 1 g cm⁻¹ s⁻¹ = 0.1 kg m⁻¹ s⁻¹ = 0.1 Pa s → 1 cP = 10⁻³ Pa s

Todas las magnitudes se han pasado a S.I.

T10.2.- Calcular la eficiencia de un ciclón con $W_i=15$ cm, $v_c=18$ m/s y $N=5$, para $d=1$ μm. Datos: viscosidad del aire a 20 °C: 0.018 cP, densidad de las partículas: 2 g /cm³.

$$R_b = \frac{\pi N v_c d^2 \rho}{9 W_i \eta} = 0.0233 \quad \text{en la asunción del flujo en bloque}$$

$R_m = 1 - \exp(-R_b) = 0.0233$ en la asunción del flujo mezclado (para rendimientos tan bajos, apenas hay diferencias entre los dos modelos).

T10.3.- Los multiciclones, un conjunto de ciclones miniaturizados por los que el flujo pasa en paralelo, son más eficientes en la captación: Si consideramos un ciclón grande con eficiencia de captura del 30% para partículas de 3 μ, cuál es la eficiencia para un conjunto de ciclones de misma geometría pero con todas dimensiones de la mitad (V_c se mantiene igual!)

Asumiremos flujo en bloque:

$$R_b = \frac{\pi N v_c d^2 \rho}{9 W_i \eta} = 0.3$$

El único parámetro que se ve afectado al escalar el ciclón es W_i que pasa a la mitad, dado que los demás dependen del flujo (v_c), del medio (η) o de la partícula (d, ρ).

$$R'_b = \frac{\pi N v_c d^2 \rho}{9(W_i/2)\eta} = 2R_b = 0.6$$

Las partículas de 3 micras se captan con un 60% de eficiencia.

P10.1- Un sedimentador por gravedad tiene una longitud de 20 metros. Se recogen el 40% de las partículas. Si se dobla la longitud del sedimentador ¿cuál será el porcentaje de partículas captadas? Asumir un flujo en bloque.

$$R_b = \frac{L}{H} \frac{g d^2 \rho}{18 \eta V_x}$$

Si $L'=2L$, $R'_b=2R_b=2*0.4=0.8$
80%

P10.2- Un sedimentador por gravedad tiene una longitud de 20 metros y una velocidad horizontal de 1 m/s. El diámetro de corte es de 50 μm . Si se dobla la velocidad horizontal del gas ¿cuál será el diámetro de corte? Asumir un flujo en bloque.

$$R_b = \frac{L}{H} \frac{g(50 \times 10^{-6})^2 \rho}{18 \eta V_x} = 0.5$$

Buscamos el nuevo diámetro de corte:

$$R'_b = \frac{L}{H} \frac{g d'^2 \rho}{18 \eta (2V_x)} = 0.5$$

$$\Rightarrow \frac{d'^2}{2} = (50 \times 10^{-6})^2$$

$$d' = \sqrt{2}d = 71 \mu\text{m}$$

P10.3- En un sedimentador por gravedad en un determinado régimen de funcionamiento, se recogen el 40% de las partículas. Si se dobla el caudal del gas ¿cuál será el porcentaje de partículas captadas? Asumir un flujo en bloque.

Dado que el ancho W y el alto H del sedimentador no cambian (consideramos el mismo sedimentador), esto significa que $V'_x=2V_x$

$$Q = HWV_x$$

$$Q' = 2Q$$

$$\Leftrightarrow HWV'_x = HWV_x$$

$$\Leftrightarrow V'_x = V_x$$

$$R'_b = \frac{R_b}{2} = 20\%$$

P10.4- Un ciclón se analiza con el modelo de flujo en bloque. Se calcula una eficiencia de captura del 150%. Con los mismos datos geométricos y operativos, se utiliza el modelo de mezcla total. ¿Cuál es la eficiencia de captura?

$$R_m = 1 - e^{-R_b} = 77.7\%$$

P10.5- Un ciclón tiene una eficiencia de captura del 70% para partículas de 5 μm . ¿Cuál sería la eficiencia de captura para partículas de 5 μm si el flujo pasa por dos ciclones de estas características dispuestos en serie? Asumir flujo en bloque en los ciclones y mezcla total en la tubería de un ciclón a otro.

El primer ciclón captura el 70% de las partículas. El segundo ciclón captura el 70% de las partículas no capturadas. Céntrandonos en las partículas no capturadas, hay:

$$0.3 * 0.3 = 0.09 = 9\%$$

La eficiencia de captura del sistema es de 91%.