

CALCULOS DE EXPLOSIVOS:

BALANCE DE OXIGENO, VOLUMEN GRUESO Y CALOR DE EXPLOSIÓN

Estas notas están tomadas del texto "Problemas resueltos de Química Aplicada" de Orozco et al., 2011, ed. Paraninfo.

Los explosivos son sustancias capaces de desprender una gran cantidad de gases y de calor, mediante una reacción química rapidísima, producida por una causa externa de tipo mecánico o térmico.

La reacción de explosión es un proceso de oxidación-reducción interna en el que se combinan los elementos de la molécula de explosivo, sin intervenir oxígeno externo a la molécula.

- El balance de oxígeno de un explosivo valora la suficiencia o no de oxígeno en la molécula de explosivo para lograr que todo su contenido en C se convierta a CO₂ y todo el contenido en H se convierta a H₂O. La fuerza y la potencia rompedora de un explosivo aumentan con el balance de oxígeno.

Para un explosivo de fórmula genérica C_aH_bO_cN_d, el balance de oxígeno expresado en porcentaje de oxígeno es:

$$B.O. = \frac{[(c - 2a - 0,5b) \text{ moles de O/mol explosivo}] \times (16 \text{ g O/1 mol O}) \times (1 \text{ mol explosivo/--- g})}{\text{--- g}} \times 100$$

- Si $c > (2a + 0,5b)$, será un explosivo con exceso de oxígeno (balance positivo)
- Si $c < (2a + 0,5b)$, será un explosivo con defecto de oxígeno (balance negativo), en este caso, los productos reales de explosión no coincidirán con los utilizados para el cálculo teórico de este parámetro.

- El volumen grueso, V (expresado en Nlitros/kg ó en Nm³/kg), es el volumen de gas generado por la explosión de 1 kg de explosivo. Puede calcularse conociendo el número de moles de gas liberados por la explosión, aplicando la ley de Gases Ideales a 25 °C y 1 at.

- El calor de explosión, Q (expresado en kJ/kg o en Kcal/kg), es el calor liberado en la reacción de explosión.

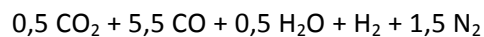
EJEMPLOS

1. Calcular el balance de oxígeno del explosivo trinitroglicerina ($C_3H_5N_3O_9$) y determinar cuál debe ser la proporción en masa de una mezcla de trinitrobenceno ($C_6H_3N_3O_6$) con este explosivo para conseguir una mezcla explosiva con un balance de oxígeno nulo.

-
2. Una fábrica de explosivos produce 2,4,6-trinitrofenol ($C_6H_3N_3O_7$) mediante una reacción entre el fenol (C_6H_6O) y el ácido nítrico (HNO_3). Calcular:

(a) Las toneladas de explosivo que se pueden obtener si se dispone de 2 toneladas de fenol del 89% riqueza en peso y $2,5 \text{ m}^3$ de una disolución de ácido nítrico del 36% peso y densidad de la disolución $1,22 \text{ g/cm}^3$.

(b) El balance de oxígeno y el volumen grueso del explosivo ($C_6H_3N_3O_7$), sabiendo que los productos obtenidos en su reacción de explosión por cada mol de explosivo son:

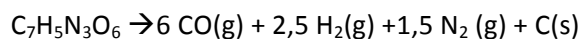


-
3. El 2,4,6-trinitrotolueno (TNT) es un explosivo de uso muy extendido. Calcular para este explosivo:

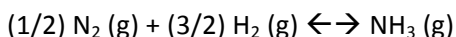
(a) El balance de oxígeno

(b) La cantidad de nitrato amónico ($(NH_4)NO_3$), expresada en kg, que sería preciso añadir a un kg de TNT para conseguir una mezcla explosiva con balance de oxígeno nulo.

(c) El volumen grueso expresado en Nm^3/kg , sabiendo que su reacción real de explosión es:

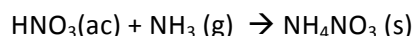


4. El amoníaco puede obtenerse por reacción directa del nitrógeno gaseoso con hidrógeno gaseoso:

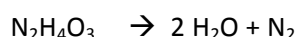
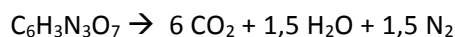


- (a) Calcular la energía vinculada a esta reacción e indicar si la reacción es exotérmica ó endotérmica. Dato: Entalpía de formación estándar del $\text{NH}_3 = -45,9 \text{ kJ/mol}$.
- (b) La reacción posterior del amoníaco con ácido nítrico conduce a la obtención de nitrato de amonio, sustancia que puede emplearse como abono y también como explosivo. Calcular el volumen (m^3) de ácido nítrico del 38% masa y densidad $1,234 \text{ g/cm}^3$ que tendrán que utilizarse si se desean obtener 450 kg de nitrato de amonio, sabiendo que el rendimiento de la reacción es del 76%.
- (c) Calcular el balance de oxígeno y el volumen grueso del nitrato de amonio expresado en $\text{Nm}^3 \text{ gas/kg}$ explosivo.
-

5. El nitrato de amonio (NH_4NO_3) se puede emplear como explosivo y como abono, y se obtiene industrialmente por reacción directa entre el ácido nítrico (HNO_3) y el amoníaco (NH_3) en estado gaseoso



- (a) Calcular la cantidad máxima de producto NH_4NO_3 (en toneladas) que se puede obtener en el proceso que transcurre con rendimiento 74% , si se dispone de:
- 2 toneladas de disolución de HNO_3 del 60 % pureza (en peso), y
 - 200 m^3 de $\text{NH}_3(\text{g})$ a 20°C y 3 at.
- (b) Habitualmente la industria aprovecha recupera el calor desprendido en los procesos. Si en este proceso de obtención de NH_4NO_3 se generan $8,9 \text{ kcal/mol}$, calcular la cantidad de combustible propano (C_3H_8) que se podría ahorrar, para generar una cantidad de calor semejante a la desprendida en la síntesis de 1 tonelada de NH_4NO_3 . Los resultados de cantidad de propano se deben dar tanto en moles, masa y en volumen (a 25°C y 1 at).
- (c) Calcular con qué cantidad de trinitrofenol ($\text{C}_6\text{H}_3\text{N}_3\text{O}_7$) sería preciso mezclar un kilogramo de NH_4NO_3 para obtener una mezcla explosiva de balance de oxígeno nulo. Las reacciones son:



Datos de masas atómicas: N (14), O (16), H(1), C(12).

Datos de entalpías de formación estándar ΔH_f° (kcal/mol):

$\text{CO}_2(\text{g}): -94,1$; $\text{H}_2\text{O}(\text{l}): -68,3$; $\text{C}_3\text{H}_8 (\text{g}): -24,8$