

PA_6. Reacciones químicas reversibles. Cálculos del equilibrio químico.
Influencia de la presión. Aplicación a las reacciones del REFORMADO
CATALITICO

Ejemplo: reacción de deshidrogenación de ciclohexano para formar benceno:



Si se conoce que la energía libre de Gibbs de una reacción química a una temperatura y presión dadas, a partir de ΔG^0 se puede obtener la constante de equilibrio químico de la reacción:

$$\Delta G^0 = -RT \ln (K)$$

Y la constante de equilibrio se relaciona con los reactivos y productos, por ejemplo en esta reacción:

$$K = \frac{P_{benceno} P_{hidrógeno}^3}{P_{ciclohexano}}$$

Siendo las presiones parciales $P_{benceno}$, $P_{hidrógeno}$ y $P_{ciclohexano}$, que se pueden poner como producto de la presión total (P_T) y la fracción molar (y):

$$K = \frac{P_T y_{benceno} (P_T y_{hidrógeno})^3}{P_T y_{ciclohexano}}$$

Por ello, conocido el valor de la constante de equilibrio, se puede obtener la composición en el equilibrio y calcular la conversión en el equilibrio para la reacción a unas determinadas condiciones de temperatura y presión.

Datos: La energía libre de Gibbs de esta reacción a 500 °C es: $\Delta G^0 = 17032,8$, y se parte de un sistema a 20 at. con 1 bbl de ciclohexano de densidad $0,779 \text{ g/cm}^3$.

Para esta reacción, utilizar la herramienta SOLVER de Excel para:

- calcular la composición en el equilibrio y la conversión correspondiente, y
- calcular esta conversión de equilibrio a diferentes presiones y obtener la relación gráfica.