

PA_8. Reacciones químicas reversibles. Cálculos del equilibrio químico, Aplicación a las reacciones de ALQUILACION

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

Planteamiento para un ejemplo de alquilación:

Considerar la siguiente reacción en fase líquida que tiene lugar en el reactor de alquilación:



definiendo

y conversión

R cociente entre los moles iniciales de los reactivos: $R = m_{B0}/m_{A0}$

se pueden expresar los moles de cada compuesto como:

$$A: \quad m_A = m_{A0} - m_{A0}y$$

$$B: \quad m_B = m_{B0} - m_{A0}y$$

$$A1: \quad m_{A1} = m_{A0}y$$

y los moles totales:

$$m_A + m_B + m_{A1} = m_{A0}(1 + R - y)$$

por lo que se puede expresar la constante de equilibrio en fracciones molares como una función del ratio R y la conversión:

$$K_{xeq} = \frac{x_{A1}}{x_A x_B}$$

Para esta reacción química de alquilación:

- (a) Deducir la expresión que permite calcular la conversión a partir de la ecuación anterior de K_{xeq} .

y= ecuación

- (b) Con la expresión deducida, calcular la conversión en el equilibrio a 300 K, conociendo $K_{xeq} = 2,6E6$.

- (c) Obtener y graficar la relación conversión -ratio m_{B0}/m_{A0} para diferentes constantes de equilibrio K_{xeq} : 2,6E6, 4,5E3, 100, 10, 1 y 0,1. Utilizar el intervalo de ratio : 0,1-5.