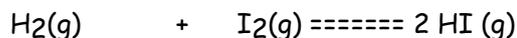


Cálculo de la composición de equilibrio a partir de la constante

El equilibrio de formación del HI tiene una constante $K_c = 54,4$ a 698 K. En un matraz de 10 L se introducen 0,1 moles de H_2 y 0,1 moles de I_2 . Calcular las concentraciones en el equilibrio

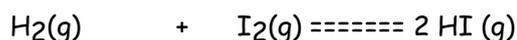


[] ₀	$\frac{0,1\text{mol}}{10L} = 0,01M$	$\frac{0,1\text{mol}}{10L} = 0,01M$	0
[] _{reac}	x	x	2x [] _{Forma}
[] _e	0,01 - x	0,01 - x	2x

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H_2] \cdot [I_2]} = \frac{[2x]^2}{[0,01-x] \cdot [0,01-x]} = \frac{[2x]^2}{[0,01-x]^2}$$

$$54,4 = \frac{[2x]^2}{[0,01-x]^2}; \quad \sqrt{54,4} = \sqrt{\frac{[2x]^2}{[0,01-x]^2}}; \quad 7,4 = \frac{[2x]}{[0,01-x]}$$

$$0,074 - 7,4x = 2x; \quad 0,074 = 9,4x; \quad x = \frac{0,074}{9,4} = 7,9 \cdot 10^{-3} M$$



[] _e	0,01 - x = 0,01 - 7,9 · 10⁻³ = 2,1 · 10⁻³ M	0,01 - x = 0,01 - 7,9 · 10⁻³ = 2,1 · 10⁻³ M	2x = 2 · 7,9 · 10⁻³ = 0,016 M
------------------	--	--	---

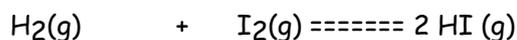
1) A partir de los cantidades iniciales se calculan las concentraciones iniciales de los reactivos.

2) Suponemos que **reacciona una cantidad x** de uno de los reactivos y de ahí, por estequiometría se deduce la cantidad de los otros reactivos que reaccionan y la cantidad de productos que se forman

3) Conociendo las cantidades iniciales y las que reaccionan se deducen las concentraciones en el equilibrio

4) Se llevan estas concentraciones a la constante de equilibrio y se calcula **x**. Conocida **x** se calculan las concentraciones de equilibrio

El mismo ejercicio se podría resolver planteando **como incógnita el grado de disociación** del H_2 de la siguiente manera:



[] ₀	$\frac{0,1\text{mol}}{10L} = 0,01M$	$\frac{0,1\text{mol}}{10L} = 0,01M$	0
[] _{reac}	0,01α.	0,01α.	2.0,01α [] _{Forma}
[] _e	0,01 - 0,01α = 0,01(1-α)	0,01 - 0,01α = 0,01(1-α)	0,02 α.

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H_2] \cdot [I_2]} = \frac{0,02\alpha^2}{[0,01(1-\alpha)]^2}; \quad 54,4 = \frac{0,02\alpha^2}{[0,01(1-\alpha)]^2}$$

$$\sqrt{54,4} = \sqrt{\frac{0,02\alpha^2}{[0,01(1-\alpha)]^2}}; \quad 7,4 = \frac{0,02\alpha}{[0,01(1-\alpha)]}; \quad \alpha = 0,74$$

[] _e	0,01(1-α) = 2,6 · 10⁻³ M	0,01(1-α) = 2,6 · 10⁻³ M	0,02 α = 0,015 M.
------------------	--	--	--------------------------

1) A partir de los cantidades iniciales se calculan las concentraciones iniciales de los reactivos.

2) Suponemos que **el grado de disociación del H_2 es α**. Por tanto la cantidad de H_2 que reacciona es $0,01\alpha$. A partir de este dato, por estequiometría, se conoce la cantidad de I_2 que reacciona y la cantidad de HI que se obtiene

3) Conociendo las cantidades iniciales y las que reaccionan se deducen las concentraciones en el equilibrio

4) Se llevan estas concentraciones a la constante de equilibrio y se calcula **α**. Conocida **α** se calculan las concentraciones de equilibrio

Importante: Si en un problema no se conoce el volumen del recipiente no se podrá conocer la concentración inicial a partir del nº de moles. En esos casos conviene plantear el problema en moles (moles iniciales, moles que reaccionan y moles en el equilibrio) y al llegar a las condiciones de equilibrio se divide entre el volumen V para expresar la concentración de equilibrio

Cálculo de K_p y/o K_c a partir de datos iniciales y algún dato de equilibrio

Al calentar dióxido de nitrógeno en un recipiente cerrado, se descompone según: $2 \text{NO}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NO}(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g})$

Un recipiente contiene inicialmente 0,0189 mol/ L de NO_2 . Se calienta hasta 327 °C y, una vez alcanzado el equilibrio, la concentración de NO_2 es de 0,0146 mol/l. Calcula K_p , K_c y P total en el equilibrio.

	$2 \text{NO}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NO}(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g})$			
[]	0,0189	0	0	
[] _{rea}	$4,3 \cdot 10^{-3}$	$4,3 \cdot 10^{-3}$	$2,15 \cdot 10^{-3}$	[] _{forma}
[] _e	0,0146	$4,3 \cdot 10^{-3}$	$2,15 \cdot 10^{-3}$	
$P_{p_e} = c \cdot R \cdot T$	0,72	0,21	0,11	

$$K_p = \frac{P^2(\text{NO}) \cdot P(\text{O}_2)}{P^2(\text{NO}_2)} = \frac{0,21^2 \cdot 0,11}{0,72^2} = 9,3 \cdot 10^{-3}$$

$$K_c = K_p / (RT)^{\Delta n} = 9,3 \cdot 10^{-3} / (0,082 \cdot 600)^{3-1} = 1,9 \cdot 10^{-4}$$

$$P_T = 0,72 + 0,21 + 0,11 = 1,04 \text{ atm}$$

- 1) A partir de la concentración inicial de NO_2 y la concentración en el equilibrio, calculamos la concentración que reacciona de $\text{NO}_2 = 0,0189 - 0,0146 = 4,3 \cdot 10^{-3} \text{ M}$
- 2) Conociendo la concentración de NO_2 que reacciona se determina, por estequiometría, la cantidad de NO y O_2 que se obtienen. Así se conocen todas las concentraciones en el equilibrio.
- 3) Para determinar las presiones parciales en el equilibrio se aplica la expresión $P_p = c \cdot R \cdot T$
- 4) Se calcula K_p a través de su expresión y P total sumando las presiones parciales

Cálculo de K_p y/o K_c a partir de datos iniciales y del grado de disociación

- Se denomina **Grado de disociación, α** , de un reactivo a la Fracción de cada mol de reactivo que reacciona en un equilibrio químico
- $\alpha =$ concentración o moles de reactivo que reaccionan / concentración o moles de reactivo inicial
- $c\alpha =$ concentración o moles de reactivo que reacciona (Esta expresión es independiente del ajuste del equilibrio)
- **Con frecuencia en los problemas encontramos el dato del grado de disociación expresado en %. Para utilizarlo debemos calcularlo en tanto por uno, es decir dividirlo entre cien.**

P8. A 200°C se produce la siguiente reacción : $\text{Xe}(\text{g}) + 2 \text{F}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{XeF}_4(\text{g})$.

Se mezclan 0,4 moles de Xe con 0,8 moles de flúor en un recipiente de 2 L. Cuando se alcanza el equilibrio solo el 60% de Xe se ha convertido en XeF_4 . Determina las constantes K_c y K_p y la presión en el equilibrio



[] _o	0.4/2=0.2	0.8/2 = 0.4	0
[] _{reac}	$c_o \cdot \alpha = 0,2 \times 0,6 = 0,12$	$2 \cdot c_o \cdot \alpha = 2 \cdot 0,12 = 0,24$	$c_o \cdot \alpha = 0,12$
[] _e	$0,2 - 0,12 = 0,08$	$0,4 - 0,24 = 0,16$	0,12
$P_p \text{ equil} = cRT$	0,08.RT	0,16 RT	0,12.RT

1. En primer lugar se determinan las concentraciones iniciales
2. Por la definición de grado de disociación se deduce que la cantidad de Xe que ha reaccionado es $c_o \alpha = 0.2 \times 0.6$
3. A partir de esta cantidad, por estequiometría se deduce la cantidad de F_2 que reacciona y la cantidad obtenida de XeF_4
4. Se obtienen las concentraciones en el equilibrio y las presiones parciales
5. En último lugar se aplica la ley de Dalton de los gases: $P_T = \Sigma P_p$

$$K_c = \frac{[\text{XeF}_4]}{[\text{Xe}][\text{F}_2]^2} = \frac{0,12}{0,08 \times (0,16)^2} = 58,6$$

$$K_p = K_c \cdot (RT)^{\Delta n} = 58,6 \cdot (0,082 \cdot 473)^{1-3} = 0,039$$

$$P_e = 0,08RT + 0,16 \cdot RT + 0,12 \cdot RT = 0,36 \cdot RT = 13,9 \text{ atm}$$

Cálculo de K_p y/o K_c a partir de la presión de equilibrio y del grado de disociación

A 450 °C y 10 atm el amoníaco está disociado en un 95,7 % en sus elementos. Calcular K_p y K_c para ese equilibrio

	2. NH ₃ (g)	=====	N ₂ (g)	+	3 H ₂ (g)
n_o	n		0		0
n reac	n. α		n. α/2		3. n. α/2 n forma
n e	$n - n\alpha = n(1 - \alpha) =$ $n(1 - 0,957) = 0,04n$		$\frac{n \cdot \alpha}{2} = \frac{n \cdot 0,957}{2} = 0,5n$		$\frac{3 \cdot n \cdot \alpha}{2} = \frac{3 \cdot n \cdot 0,957}{2} = 1,42n$
Pp eq= xP_t	$\frac{0,04n}{(0,04n + 0,5n + 1,42n)} \cdot 10 = 0,2 \text{ atm}$		$\frac{0,5n}{1,96n} \times 10 = 2,55 \text{ atm}$		$\frac{1,42n}{1,96n} \times 10 = 7,2 \text{ atm}$

$$K_p = \frac{P(\text{N}_2) \times P(\text{H}_2)^3}{P(\text{NH}_3)^2} = \frac{2,55 \times (7,2)^3}{(0,2)^2} = 2,2 \cdot 10^4$$

$$K_p = K_c \cdot (R \cdot T)^{\Delta n} \quad K_c = K_p / (RT)^{\Delta n};$$

$$K_c = 2,2 \cdot 10^4 / (0,082 \cdot 723)^{4-2} = 6,3$$

- 1) Por la definición de grado de disociación se deduce que la cantidad de NH₃ que ha reaccionado es **nα**
- 2) A partir de esta cantidad, por estequiometría se deduce la cantidad obtenida de N₂ y H₂.
- 3) Se obtienen moles en el equilibrio y las presiones parciales en el equilibrio

Calculo de K_p y K_c a partir de la concentración inicial y P de equilibrio

Un matraz de un litro contiene 6,28 milimoles de N₂O₄. Al calentar a 25°C, la presión es de 0,2118 atm. Calcula K_c , K_p y el grado de disociación para la descomposición del N₂O₄ gas para dar NO₂ gas. A esa temperatura.

	N ₂ O ₄ (g) \rightleftharpoons 2 NO ₂ (g)	
[]_o	6,28 · 10⁻³ M	0
[] reac	x	2x
[] e	6,28 · 10⁻³ - x	2x
Pp equil= cRT	(6,28 · 10⁻³ - x)RT	2x · RT

- 1) Calculamos la concentración inicial de N₂O₄
- 2) Suponemos que ha reaccionado una cantidad x de N₂O₄ y a partir de aquí calculamos la cantidad de producto obtenido
- 3) Calculamos las concentraciones en el equilibrio y las presiones parciales en el equilibrio
- 4) En último lugar se aplica la ley de Dalton de los gases: P_T = ΣP_p

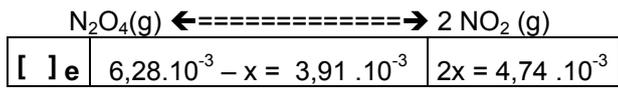
$$P_T(\text{equil}) = \Sigma P_p(\text{equil}) \quad 0,2118 = 6,28 \cdot 10^{-3} RT - xRT + 2xRT \quad 0,2118 = 6,28 \cdot 10^{-3} RT + xRT$$

$$x = \frac{0,2118 - 6,28 \cdot 10^{-3} RT}{RT} = 2,37 \cdot 10^{-3}$$

5) A continuación determinamos el grado de disociación α = cantidad que reacciona / cantidad inicial

$$\alpha = 2,37 \cdot 10^{-3} / 6,28 \cdot 10^{-3} = 0,377 \quad \text{----} \rightarrow \quad \alpha = 37,7 \%$$

6) Calculamos ahora la concentración en el equilibrio



$$K_c = \frac{[\text{NO}_2]^2}{[\text{N}_2\text{O}_4]} = \frac{(4,74 \cdot 10^{-3})^2}{3,91 \cdot 10^{-3}} = 5,74 \cdot 10^{-3}$$

$$K_p = K_c \cdot R T^{\Delta n} = 5,74 \cdot 10^{-3} \cdot R T^1 = 0,14$$