Ejercicio 1 y 2 clase RRBBS parte 2

Luis García Aguirre

Sobre el valor de la constante de equilibrio (K_{eq})

Clásicamente vemos esta ecuación química (reversible) de ejemplo, que muestra explícitamente las proporciones estequiométricas entre reactivos y productos:

$$aA + bB \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} cC + dD$$

Sin embargo, en este caso, que queremos simplificarla. Queremos un vector con todas las concentraciones en el equilibrio de cada lado de la ecuación y a éstas repitiéndose tantas veces como lo indique su coeficiente de equilibro. Así la ecuación se puede expresar de manera generalizada como:

$$\sum_{i=1}^{n}([reactivo]_{eq})_i \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \sum_{i=1}^{m}([producto]_{eq})_i$$

En esta expresión, no tienen cabida las ecuaciones expresadas con coeficientes estequiométricos inferiores a 1 ($i = 1$). Y los productos de los coeficientes y las concentraciones de los elementos se expresan como sumas de las propias concentraciones. Este mismo enfoque vectorial permite escribir la K_{eq} tal que:

$$K_{eq} = \frac{K_1}{K_2} = \frac{\prod_{i=1}^{m}([producto]_{eq})_i}{\prod_{i=1}^{n}([reactivo]_{eq})_i}$$

Lo cual, también será útil para su translación programática en los ejercicios para calcular el valor simplemente como el cociente de dos productorios.

Sobre las unidades de la constante de equilibrio (K_{eq})

Las unidades de la constante de equilibrio dependen del cociente de las constantes de reacción de ambos lados de la ecuación. A su vez, éstos dependen de la cantidad de elementos involucrados en la ecuación.

Sea la velocidad de formación de productos o reactivos: $\dot{C} = \frac{\delta C}{\delta t}$, siendo 1 el exponente de C y tomando n y m de la expresión vectorial anterior (con los coeficientes estequiométricos expresados como sumas); entonces, el exponente a de las unidades de K_1 ($\frac{1}{C^a \times t}$) se puede calcular como: $\sum_{i=1}^{n} 1 - 1 = n_{reactivos} - 1$. Del mismo modo, el exponente b de las unidades de K_2 ($\frac{1}{C^b \times t}$) se puede calcular como: $\sum_{i=1}^{m} 1 - 1 = n_{productos} - 1$.

Finalmente,

$$K_{eq} = \frac{K_1}{K_2} = \frac{(\frac{1}{C^a \times t})}{(\frac{1}{C^b \times t})} = \frac{C^b}{C^a} = C^{b-a}$$

Ahora sabemos que las unidades de la constante de equilibrio pueden ser la concentración C elevada a un término que se puede expresar como la resta de los exponentes de la concentración en las unidades de las

constantes de reacción: $b - a$.
Sustituyendo:

$$b - a = (n_{\text{productos}} - 1) - (n_{\text{reactivos}} - 1) = n_{\text{productos}} - n_{\text{reactivos}}$$

Resolución

Ejercicio 1:

$$2NO_2 \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} N_2O_4; \quad [NO_2]_{eq} = 2,\ [N_2O_4]_{eq} = 3$$

Ejercicio 2:

$$Na_2CO_3 + CaCl_2 \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} CaCO_3 + 2NaCl$$

$$[Na_2CO_3]_{eq} = 2,\ [CaCl_2]_{eq} = 0.5,\ [CaCO_3]_{eq} = 2,\ [NaCl]_{eq} = 1.2$$

```python
def Keq(reactivos, productos):
    '''
    This function requires two arguments: a list with the equilibrium
concentration of reactives (left side) and other with the products (right side).

    Requires the concentrations to be displayed redundantly (i.e. each element
must be repeated as many times as indicated by its stoichiometric coefficient).

    Returns the numerical value and the units of the Keq.
    '''
    # Calculate the value of the Keq (quotient of products operators)
    val_r = 1; [val_r := val_r * e for e in reactivos] # denominator
    var_p = 1; [var_p := var_p * e for e in productos] # numerator
    valor_Keq = var_p / val_r

    # Calculate the exponent for the units of the Keq (b - a)
    exp_Keq = len(productos) - len(reactivos)

    return f'Value of the Keq is {valor_Keq} with units of mol^{exp_Keq}.'

# Ejercicio 1
r = [2, 2]
p = [3]
print(Keq(r, p)) # -> Value of the Keq is 0.75 with units of mol^-1.

# Ejercicio 2
r = [2, 0.5]
p = [2, 1.2, 1.2]
print(Keq(r, p)) # -> Value of the Keq is 2.88 with units of mol^1.
```