

```
> restart;
> Digits = 30: interface( displayprecision = 5 );
```

Aufgabe

Der Wert von K_p für die Reaktion: $\text{PCl}_5(\text{g}) \rightleftharpoons \text{PCl}_3(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g})$ beträgt bei $T = 500 \text{ K}$ 30 bar.

Berechnen Sie die Konzentrationen der Komponenten im Gleichgewicht in mol L^{-1} , wenn 2,0 g PCl_5 ($M = 208 \text{ g mol}^{-1}$), in einem Kolben $V = 0,5 \text{ L}$ erhitzt werden.

Rechenweg

Die Stoffmengen am Anfang der Reaktion:

Stoffmenge von PCl_5 am Anfang der Reaktion

```
> n[PCl5] = m / M;
```

$$n_{\text{PCl5}} = \frac{m}{M} \quad (1)$$

mit gegebener Masse

```
> m = 2.0*Unit(g);
```

$$m = 2.0 \text{ [g]} \quad (2)$$

und gegebener molaren Masse

```
> M = 208.0*Unit(g/mol): M = convert( rhs(%), units, g/mol );
```

$$M = 208.00 \text{ [g/mol]} \quad (3)$$

Stoffmenge von PCl_3 am Anfang der Reaktion

```
> n[PCl3] = 0;
```

$$n_{\text{PCl3}} = 0 \quad (4)$$

Stoffmenge von Cl_2 am Anfang der Reaktion

```
> n[Cl2] = 0;
```

$$n_{\text{Cl2}} = 0 \quad (5)$$

Die Reaktion läuft bis in den Gleichgewichtszustand. Der Gleichgewichtszustand wird erreicht, wenn die Stoffmenge X von PCl_5 umgesetzt wurde. Die Stoffmengen im Gleichgewichtszustand sind:

Stoffmenge von PCl_5 im Gleichgewichtszustand

```
> n'[PCl5] = n[PCl5] - X;
```

$$n'_{\text{PCl5}} = n_{\text{PCl5}} - X \quad (6)$$

```
> subs((1),(6));
```

$$n'_{\text{PCl5}} = \frac{m}{M} - X \quad (7)$$

Stoffmenge von PCl_3 im Gleichgewichtszustand

```
> n'[PCl3] = n[PCl3] + X;
```

$$n'_{\text{PCl3}} = n_{\text{PCl3}} + X \quad (8)$$

```
> subs((4),(8));
```

$$n'_{\text{PCl3}} = X \quad (9)$$

Stoffmenge von Cl_2 im Gleichgewichtszustand

```
> n'[Cl2] = n[Cl2] + X;
```

$$(10)$$

$$n'_{Cl_2} = n_{Cl_2} + X \quad (10)$$

> subs ((5),(10)) ;

$$n'_{Cl_2} = X \quad (11)$$

Annahme: Alle Komponenten können mit dem idealen Gasgesetz beschrieben werden.
Der Partialdruck p der Stoffmenge n im Volumen V bei der Temperatur T

> p = n*R*T/V;

$$p = \frac{n R T}{V} \quad (12)$$

dabei ist die allgemeine Gaskonstante

> R = ScientificConstants[Constant](R,'units'): evalf(%): lhs(%) =
convert(rhs(%),units,J/(mol*K)) ;

$$R = 8.3145 \left[\frac{J}{mol K} \right] \quad (13)$$

Volumen V und Temperatur T sind in der Aufgabe gegeben

> V=0.5*Unit(1), T=500.0*Unit(K) ;

$$V = 0.5 [L], T = 500.0 [K] \quad (14)$$

Partialdruck von PCl_5 im Gleichgewichtszustand

> subs (p=p' [PCl5],n=n' [PCl5],(12)) ;

$$p'_{PCl_5} = \frac{n'_{PCl_5} R T}{V} \quad (15)$$

> subs ((7),(15)) ;

$$p'_{PCl_5} = \frac{\left(\frac{m}{M} - X \right) R T}{V} \quad (16)$$

Partialdruck von PCl_3 im Gleichgewichtszustand

> subs (p=p' [PCl3],n=n' [PCl3],(12)) ;

$$p'_{PCl_3} = \frac{n'_{PCl_3} R T}{V} \quad (17)$$

> subs ((9),(17)) ;

$$p'_{PCl_3} = \frac{X R T}{V} \quad (18)$$

Stoffmenge von Cl_2 im Gleichgewichtszustand

> subs (p=p' [Cl2],n=n' [Cl2],(12)) ;

$$p'_{Cl_2} = \frac{n'_{Cl_2} R T}{V} \quad (19)$$

> subs ((11),(19)) ;

$$p'_{Cl_2} = \frac{X R T}{V} \quad (20)$$

Das Massenwirkungsgesetz im Gleichgewichtszustand mit den Partialdrücken formuliert.

> K[p] = p' [Cl2]*p' [PCl3]/p' [PCl5] ;

$$K_p = \frac{p'_{Cl_2} p'_{PCl_3}}{p'_{PCl_5}} \quad (21)$$

Die Gleichgewichtskonstante ist in der Aufgabe gegeben

```
> K[p] = 30.0*Unit(bar);
```

$$K_p = 30.0 \text{ [bar]} \quad (22)$$

Die Partialdrücke einsetzen.

```
> subs( (16),(18),(20), (21) );
```

$$K_p = \frac{X^2 R T}{V \left(\frac{m}{M} - X \right)} \quad (23)$$

Die Gleichung auflösen nach der Unbekannten X. (Die Stoffmenge muss positiv sein, damit gibt es nur eine Lösung.)

```
> isolate((23),X): simplify(% ,size);
```

$$X = \frac{-K_p V M + \sqrt{K_p^2 V^2 M^2 + 4 R T M K_p V m}}{2 R T M} \quad (24)$$

Auf der rechten Seite stehen nur bekannte Größen. Einsetzen und ausrechnen.

```
> subs( (2),(3),(13),(14),(22), (24) ): simplify(%);
```

$$X = 0.0093720 \text{ [mol]} \quad (25)$$

Die Stoffmengen im Gleichgewicht über (7), (9) und (11) ausrechnen.

```
> subs( (2),(3), (25), (7) ): simplify(%);
```

$$n'_{PCl5} = 0.00024343 \text{ [mol]} \quad (26)$$

```
> subs( (25), (9) );
```

$$n'_{PCl3} = 0.0093720 \text{ [mol]} \quad (27)$$

```
> subs( (25), (11) );
```

$$n'_{Cl2} = 0.0093720 \text{ [mol]} \quad (28)$$

Die Konzentration c der Stoffmenge n im Volumen V ist

```
> c = n /V;
```

$$c = \frac{n}{V} \quad (29)$$

Konzentration von PCl_5 im Gleichgewichtszustand

```
> c'[PCl5] = n'[PCl5]/V;
```

$$c'_{PCl5} = \frac{n'_{PCl5}}{V} \quad (30)$$

```
> subs((14),(26),(30)): simplify(%): lhs(%)=convert(rhs(%),units,mol/l);
```

$$c'_{PCl5} = 0.00048686 \left[\frac{\text{mol}}{\text{L}} \right] \quad (31)$$

Konzentration von PCl_3 im Gleichgewichtszustand

```
> c'[PCl3] = n'[PCl3]/V;
```

$$c'_{PCl3} = \frac{n'_{PCl3}}{V} \quad (32)$$

```
> subs((14),(27),(32)): simplify(%): lhs(%)=convert(rhs(%),units,mol/l);
```

$$c'_{PCl3} = 0.018744 \left[\frac{\text{mol}}{\text{L}} \right] \quad (33)$$

Konzentration von Cl

₂ im Gleichgewichtszustand

```
> c'[Cl2] = n'[Cl2]/V;
```

$$c'_{Cl_2} = \frac{n'_{Cl_2}}{V} \quad (34)$$

```
> subs((14),(28),(34)): simplify(%): lhs(%)=convert(rhs(%),units,mol/l)
;
```

$$c'_{Cl_2} = 0.018744 \left[\frac{\text{mol}}{\text{L}} \right] \quad (35)$$