

## Equilibrio químico en fase gas

### ◇ PROBLEMAS

#### ● Con datos do equilibrio

1. Nun reactor de 5 dm<sup>3</sup> introdúcese 15,3 g de CS<sub>2</sub> e 0,82 g de H<sub>2</sub>. Ao elevar a temperatura ata 300 °C alcázase o seguinte equilibrio:  $\text{CS}_2(\text{g}) + 4 \text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2\text{S}(\text{g}) + \text{CH}_4(\text{g})$ , onde a concentración de metano no equilibrio é de 0,01 mol/dm<sup>3</sup>.
- a) Calcula as concentracións molares das especies CS<sub>2</sub>(g), H<sub>2</sub>(g) e H<sub>2</sub>S(g) no equilibrio.
- b) Determina o valor de K<sub>c</sub> e discute razoadamente que lle sucederá ó sistema en equilibrio se engadimos máis cantidade de CS<sub>2</sub>(g) mantendo o volume e a temperatura constantes.
- Dato:  $R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ . (A.B.A.U. ord. 23)
- Rta.:** a) [CS<sub>2</sub>] = 0,0302; [H<sub>2</sub>] = 0,0413; [H<sub>2</sub>S] = 0,0200 mol/dm<sup>3</sup>; b) K<sub>c</sub> = 45,3; Desprázase cara á dereita.

#### Datos

Gas: volume

temperatura

Masa inicial: disulfuro de carbono

hidróxeno

Concentración de metano no equilibrio

Masa molar: disulfuro de carbono

hidróxeno

Constante dos gases ideais

#### Cifras significativas: 3

$$V = 5,00 \text{ dm}^3$$

$$T = 300 \text{ °C} = 573 \text{ K}$$

$$m_0(\text{CS}_2) = 15,3 \text{ g}$$

$$m_0(\text{H}_2) = 0,820 \text{ g}$$

$$[\text{CH}_4]_e = 0,0100 \text{ mol/dm}^3$$

$$M(\text{CS}_2) = 76,1 \text{ g/mol}$$

$$M(\text{H}_2) = 2,02 \text{ g/mol}$$

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

#### Incógnitas

Concentración molar de cada especie no equilibrio

$$[\text{CS}_2]_e, [\text{H}_2]_e, [\text{H}_2\text{S}]_e$$

Constante de equilibrio das concentracións

$$K_c$$

#### Outros símbolos

Concentración dunha especie X

$$[X]$$

Cantidade da substancia X no equilibrio

$$n_e(X)$$

#### Ecuacións

Concentración da substancia X

$$[X] = n(X) / V$$

Ecuación de estado dos gases ideais

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

Constante do equilibrio:  $a \text{ A} + b \text{ B} \rightleftharpoons c \text{ C} + d \text{ D}$

$$K_c = \frac{[\text{C}]_e^c \cdot [\text{D}]_e^d}{[\text{A}]_e^a \cdot [\text{B}]_e^b}$$

#### Solución:

a) As cantidades iniciais de CS<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> son:

$$n_0(\text{CS}_2) = \frac{15,3 \text{ g}}{76,1 \text{ g/mol}} = 0,201 \text{ mol CS}_2$$

$$n_0(\text{H}_2) = \frac{0,820 \text{ g}}{2,02 \text{ g/mol}} = 0,407 \text{ mol H}_2$$

Se no equilibrio hai 0,0100 mol/dm<sup>3</sup> de CH<sub>4</sub>, a cantidade deste que se formou foi:

$$n_e(\text{CH}_4) = 0,0100 \text{ mol/dm}^3 \cdot 5,00 \text{ dm}^3 = 0,0500 \text{ mol}$$

Faise unha táboa coas cantidades de cada gas e, da estequiometría da reacción, calcúlanse as restantes cantidades no equilibrio.

		CS <sub>2</sub>	4 H <sub>2</sub>	⇌	2 H <sub>2</sub> S	CH <sub>4</sub>	
Cantidad inicial	$n_0$	0,201	0,407		0	0	mol
Cantidad que reacciona	$n_r$	0,0500	0,200	→	0,100	0,0500	mol
Cantidad no equilibrio	$n_e$	0,201 - 0,0500 = 0,151	0,407 - 0,200 = 0,207		0,100	0,0500	mol

$$[\text{CS}_2]_e = 0,151 \text{ mol CS}_2 / 5,00 \text{ dm}^3 = 0,0302 \text{ mol / dm}^3$$

$$[\text{H}_2]_e = 0,207 \text{ mol / 5,00 dm}^3 = 0,0413 \text{ mol / dm}^3$$

$$[\text{H}_2\text{S}]_e = 0,100 \text{ mol / 5,00 dm}^3 = 0,0200 \text{ mol / dm}^3$$

b) A constante de equilibrio en función das concentracións é:

$$K_c = \frac{[\text{H}_2\text{S}]_e^2 \cdot [\text{CH}_4]_e}{[\text{CS}_2]_e \cdot [\text{H}_2]_e^4} = \frac{(0,020)^2 \cdot 0,010}{0,030 \cdot (0,041)^4} = 45,3 = 0,016 \text{ } \xi \text{ (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

Segundo o principio de Le Chatelier, se engadimos máis CS<sub>2</sub> ao sistema en equilibrio mantendo o volume e a temperatura constantes, o sistema reaxustarase para minimizar o efecto desta perturbación. Neste caso, consumirase máis CS<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> para formar máis H<sub>2</sub>S e CH<sub>4</sub> ata que se alcance un novo estado de equilibrio. Polo tanto, as concentracións de CS<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> diminuirán mentres que as concentracións de H<sub>2</sub>S e CH<sub>4</sub> aumentarán.

2. O cloro gas pódese obter segundo a reacción:  $4 \text{HCl(g)} + \text{O}_2\text{(g)} \rightarrow 2 \text{Cl}_2\text{(g)} + 2 \text{H}_2\text{O(g)}$ .  
Introdúcense 0,90 moles de HCl e 1,2 moles de O<sub>2</sub> nun recipiente pechado de 10 dm<sup>3</sup> no que previamente se fixo o baleiro. Quéntase a mestura a 390 °C e, cando se alcanza o equilibrio a esta temperatura, obsérvase a formación de 0,40 moles de Cl<sub>2</sub>.

a) Calcula o valor da constante  $K_c$ .

b) Calcula a presión parcial de cada compoñente no equilibrio e a partir delas calcula o valor de  $K_p$ .

Datos:  $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ; 1 atm = 101,3 kPa.

(A.B.A.U. ord. 19)

**Rta.:** a)  $K_c = 2,56 \cdot 10^3$ ; b)  $p(\text{HCl}) = 0,544 \text{ atm}$ ;  $p(\text{O}_2) = 5,44 \text{ atm}$ ;  $p(\text{Cl}_2) = p(\text{H}_2\text{O}) = 2,18 \text{ atm}$ ;  $K_p = 47,0$ .

### Datos

Gas: volume

temperatura

Cantidad inicial de HCl

Cantidad inicial de O<sub>2</sub>

Cantidad no equilibrio de Cl<sub>2</sub>

Constante dos gases ideais

### Incógnitas

Constante do equilibrio  $K_c$

Presións parciais de cada compoñente

Constante do equilibrio  $K_p$

### Ecuacións

Ecuación de estado dos gases ideais

Concentración da substancia X

Constantes do equilibrio:  $a \text{ A} + b \text{ B} \rightleftharpoons c \text{ C} + d \text{ D}$

### Cifras significativas: 3

$$V = 10,0 \text{ dm}^3$$

$$T = 390 \text{ }^\circ\text{C} = 663 \text{ K}$$

$$n_0(\text{HCl}) = 0,900 \text{ mol HCl}$$

$$n_0(\text{O}_2) = 1,20 \text{ mol O}_2$$

$$n_e(\text{Cl}_2) = 0,400 \text{ mol Cl}_2$$

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$K_c$$

$$p(\text{HCl}), p(\text{O}_2), p(\text{Cl}_2), p(\text{H}_2\text{O})$$

$$K_p$$

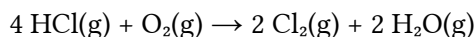
$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow p = \frac{n \cdot R \cdot T}{V}$$

$$[\text{X}] = n(\text{X}) / V$$

$$K_c = \frac{[\text{C}]_e^c \cdot [\text{D}]_e^d}{[\text{A}]_e^a \cdot [\text{B}]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(\text{C}) \cdot p_e^d(\text{D})}{p_e^a(\text{A}) \cdot p_e^b(\text{B})}$$

**Solución:**

a) Da estequiometría da reacción:



Reaccionaron 0,800 mol de HCl e 0,200 mol de O<sub>2</sub> e formouse a mesma cantidade de H<sub>2</sub>O que de Cl<sub>2</sub>.

Representamos nun cadro as cantidades (moles) de cada gas en cada fase:

		4 HCl	O <sub>2</sub>	⇌	2 Cl <sub>2</sub>	2 H <sub>2</sub> O	
Cantidade inicial	$n_0$	0,900	1,20		0,0	0,0	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	0,800	0,200		0,400	0,400	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$0,900 - 0,800 = 0,100$	$1,20 - 0,200 = 1,00$		0,400	0,400	mol

No equilibrio haberá:

$$n_e(\text{HCl}) = 0,100 \text{ mol}; n_e(\text{O}_2) = 1,00 \text{ mol}; n_e(\text{Cl}_2) = n_e(\text{H}_2\text{O}) = 0,400 \text{ mol}$$

As concentracións serán:

$$[\text{HCl}] = \frac{n_e(\text{HCl})}{V} = \frac{0,100 \text{ mol HCl}}{10,0 \text{ dm}^3} = 0,010 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{O}_2] = \frac{n_e(\text{O}_2)}{V} = \frac{1,00 \text{ mol O}_2}{10,0 \text{ dm}^3} = 0,100 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{Cl}_2] = [\text{H}_2\text{O}] = \frac{n_e(\text{Cl}_2)}{V} = \frac{0,400 \text{ mol}}{10,0 \text{ dm}^3} = 0,040 \text{ mol/dm}^3$$

A constante de equilibrio en función das concentracións é:

$$K_c = \frac{[\text{Cl}_2]_e^2 [\text{H}_2\text{O}]_e^2}{[\text{HCl}]_e^4 [\text{O}_2]_e} = \frac{0,040^2 \cdot 0,040^2}{0,010^4 \cdot 0,100} = 2,56 \cdot 10^3 \text{ (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

b) A presión parcial de cada un dos gases, suposto comportamento ideal, é a que exercería se se atopase só no recipiente.

$$p(\text{HCl}) = \frac{n(\text{HCl}) \cdot R \cdot T}{V_T} = \frac{0,100 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 663 \text{ K}}{10,0 \text{ dm}^3} = 0,544 \text{ atm}$$

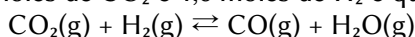
$$p(\text{O}_2) = \frac{n(\text{O}_2) \cdot R \cdot T}{V_T} = \frac{1,00 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 663 \text{ K}}{10,0 \text{ dm}^3} = 5,44 \text{ atm}$$

$$p(\text{Cl}_2) = \frac{n(\text{Cl}_2) \cdot R \cdot T}{V_T} = \frac{0,400 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 663 \text{ K}}{10,0 \text{ dm}^3} = 2,18 \text{ atm}$$

$$p(\text{H}_2\text{O}) = p(\text{Cl}_2) = 2,18 \text{ atm}$$

$$K_p = \frac{p_e^2(\text{Cl}_2) \cdot p_e^2(\text{H}_2\text{O})}{p_e^4(\text{HCl}) \cdot p_e(\text{O}_2)} = \frac{2,18^2 \cdot 2,18^2}{0,544^4 \cdot 5,44} = 47,0 \text{ (presións en atm)}$$

3. Nun recipiente de 2,0 L introdúcese 2,1 moles de CO<sub>2</sub> e 1,6 moles de H<sub>2</sub> e quéntase a 1800 °C. Unha vez alcanzado o seguinte equilibrio:



analízase a mestura e atópanse 0,90 moles de CO<sub>2</sub>. Calcula:

a) A concentración de cada especie no equilibrio.

b) O valor das constantes  $K_c$  e  $K_p$  a esa temperatura.

(A.B.A.U. ord. 17)

**Rta.:** a)  $[\text{CO}_2] = 0,45 \text{ mol/dm}^3$ ;  $[\text{H}_2] = 0,20 \text{ mol/dm}^3$ ;  $[\text{CO}] = [\text{H}_2\text{O}] = 0,60 \text{ mol/dm}^3$ ; b)  $K_p = K_c = 4,0$ .

**Datos**

Gas: volume

**Cifras significativas: 3**

$V = 2,00 \text{ dm}^3$

**Datos**

temperatura  
 Cantidad inicial de CO<sub>2</sub>  
 Cantidad inicial de H<sub>2</sub>  
 Cantidad de CO<sub>2</sub> no equilibrio

**Cifras significativas: 3**

$T = 1800\text{ }^{\circ}\text{C} = 2073\text{ K}$   
 $n_0(\text{CO}_2) = 2,10\text{ mol CO}_2$   
 $n_0(\text{H}_2) = 1,60\text{ mol H}_2$   
 $n_e(\text{CO}_2) = 0,900\text{ mol CO}_2$

**Incógnitas**

Cantidad (moles) de cada compoñente no equilibrio  
 Constantes de equilibrio

$n_e(\text{H}_2), n_e(\text{CO}), n_e(\text{H}_2\text{O})$   
 $K_c, K_p$

**Ecuacións**

Concentración da substancia X

$$[X] = n(X) / V$$

Constantes do equilibrio:  $a\text{ A} + b\text{ B} \rightleftharpoons c\text{ C} + d\text{ D}$

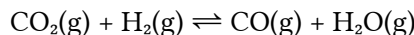
$$K_c = \frac{[C]_e^c \cdot [D]_e^d}{[A]_e^a \cdot [B]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(C) \cdot p_e^d(D)}{p_e^a(A) \cdot p_e^b(B)}$$

**Solución:**

a) Se quedan 0,900 mol dos 2,10 mol que había inicialmente, é que reaccionaron:

$$n_r(\text{CO}_2) = 2,10 - 0,900 = 1,20\text{ mol CO}_2\text{ que reaccionaron}$$

Da estequiometría da reacción:



Reaccionaron 1,20 mol de H<sub>2</sub> e formáronse os mesmos de CO e H<sub>2</sub>O.

Representamos nun cadro as cantidades (moles) de cada gas en cada fase:

		CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	$\rightleftharpoons$	H <sub>2</sub> O	CO	
Cantidad inicial	$n_0$	2,10	1,60		0,0	0,0	mol
Cantidad que reacciona ou se forma	$n_r$	1,20	1,20		1,20	1,20	mol
Cantidad no equilibrio	$n_e$	0,90	0,40		1,20	1,20	mol

No equilibrio haberá:

$$n_e(\text{CO}_2) = 0,90\text{ mol}; n_e(\text{H}_2) = 0,40\text{ mol}; n_e(\text{CO}) = n_e(\text{H}_2\text{O}) = 1,20\text{ mol}$$

As concentracións serán:

$$[\text{CO}_2] = \frac{n_e(\text{CO}_2)}{V} = \frac{0,90\text{ mol CO}_2}{2,00\text{ dm}^3} = 0,45\text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{H}_2] = \frac{n_e(\text{H}_2)}{V} = \frac{0,40\text{ mol H}_2}{2,00\text{ dm}^3} = 0,20\text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{CO}] = [\text{H}_2\text{O}] = \frac{n_e(\text{H}_2\text{O})}{V} = \frac{1,20\text{ mol}}{2,00\text{ dm}^3} = 0,60\text{ mol/dm}^3$$

b) A expresión da constante de equilibrio en función das concentracións é:

$$K_c = \frac{[\text{H}_2\text{O}]_e \cdot [\text{CO}]_e}{[\text{H}_2]_e \cdot [\text{CO}_2]_e} = \frac{\frac{1,20\text{ mol H}_2\text{O}}{2,00\text{ dm}^3} \cdot \frac{1,20\text{ mol CO}}{2,00\text{ dm}^3}}{\frac{0,90\text{ mol CO}_2}{2,00\text{ dm}^3} \cdot \frac{0,40\text{ mol CO}_2}{2,00\text{ dm}^3}} = 4,0$$

A relación entre  $K_p$  e  $K_c$  para esta reacción é

$$K_p = \frac{p_e(\text{H}_2\text{O}) \cdot p_e(\text{CO})}{p_e(\text{H}_2) \cdot p_e(\text{CO}_2)} = \frac{\frac{n_e(\text{H}_2\text{O}) \cdot R \cdot T}{V} \cdot \frac{n_e(\text{CO}) \cdot R \cdot T}{V}}{\frac{n_e(\text{H}_2) \cdot R \cdot T}{V} \cdot \frac{n_e(\text{CO}_2) \cdot R \cdot T}{V}} = \frac{[\text{H}_2\text{O}]_e \cdot [\text{CO}]_e}{[\text{H}_2]_e \cdot [\text{CO}_2]_e} = K_c$$

Polo que

$$K_p = K_c = 4,0$$

4. Considera o seguinte equilibrio:  $\text{CO}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{S}(\text{g}) \rightleftharpoons \text{COS}(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g})$ . Introdúcense 4,4 g de  $\text{CO}_2$  nun recipiente de 2 dm<sup>3</sup> a 337 °C e unha cantidade suficiente de  $\text{H}_2\text{S}$  para que, unha vez alcanzado o equilibrio, a presión total sexa de 10 atm. Se na mestura en equilibrio hai 0,01 moles de auga, calcula:

a) As concentracións de cada unha das especies no equilibrio.

b) Os valores de  $K_c$  e  $K_p$  á devandita temperatura.

Datos:  $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ; 1 atm = 101,3 kPa.

(A.B.A.U. extr. 22)

**Rta.:** a)  $[\text{CO}_2] = 0,045$ ;  $[\text{H}_2\text{S}] = 0,145$ ;  $[\text{COS}] = [\text{H}_2\text{O}] = 0,00500 \text{ mol/dm}^3$ ; b)  $K_c = K_p = 0,0038$ .

### Datos

Masa inicial de  $\text{CO}_2$

Gas: volume

temperatura

presión

Cantidade de auga no equilibrio

Constante dos gases ideais

Masa molar do dióxido de carbono

### Cifras significativas: 3

$$m_0(\text{CO}_2) = 4,40 \text{ g}$$

$$V = 2,00 \text{ dm}^3 = 2,00 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$

$$T = 337 \text{ °C} = 610 \text{ K}$$

$$p_{\text{to}} = 10,0 \text{ atm} = 1,013 \cdot 10^6 \text{ Pa}$$

$$n_e(\text{H}_2\text{O}) = 0,0100 \text{ mol H}_2\text{O}$$

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$M(\text{CO}_2) = 44,0 \text{ g/mol}$$

### Incógnitas

Concentracións de cada unha das especies no equilibrio

Constantes de equilibrio

$$[\text{CO}_2]_e, [\text{H}_2\text{S}]_e, [\text{COS}]_e, [\text{H}_2\text{O}]_e$$

$$K_c, K_p$$

### Ecuacións

Cantidade (número de moles)

Ecuación de estado dos gases ideais

$$n = m / M$$

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow p = \frac{n \cdot R \cdot T}{V}$$

Concentración da substancia X

$$[\text{X}] = n(\text{X}) / V$$

Constantes do equilibrio:  $a \text{ A} + b \text{ B} \rightleftharpoons c \text{ C} + d \text{ D}$

$$K_c = \frac{[\text{C}]_e^c \cdot [\text{D}]_e^d}{[\text{A}]_e^a \cdot [\text{B}]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(\text{C}) \cdot p_e^d(\text{D})}{p_e^a(\text{A}) \cdot p_e^b(\text{B})}$$

### Solución:

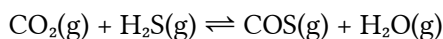
a) A cantidade inicial de  $\text{CO}_2$  é:

$$n_0(\text{CO}_2) = 4,40 \text{ g CO}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol CO}_2}{44,0 \text{ g CO}_2} = 0,100 \text{ mol CO}_2$$

Unha vez alcanzado o equilibrio, a cantidade total de gas (suposto comportamento ideal) é:

$$n_{\text{et}} = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{1,013 \cdot 10^6 \text{ Pa} \cdot 2,00 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3}{8,31 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 610 \text{ K}} = 0,399 \text{ mol total}$$

Da ecuación química dedúcese que a cantidade total de gas non varía co progreso da reacción.



Unha forma de comprobalo é supoñer que inicialmente hai  $n_1$  moles de  $\text{CO}_2(\text{g})$  e  $n_2$  moles de  $\text{H}_2\text{S}(\text{g})$ . Chamando  $x$  á cantidade de  $\text{CO}_2(\text{g})$  que reacciona ata que se alcanza o equilibrio, calcúlase a cantidade final de gas:

		$\text{CO}_2$	$\text{H}_2\text{S}$	$\rightleftharpoons$	$\text{COS}$	$\text{H}_2\text{O}$	
Cantidade inicial	$n_0$	$n_1$	$n_2$		0,00	0,00	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	$x$	$x$	$\rightarrow$	$x$	$x$	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$n_1 - x$	$n_2 - x$		$x$	$x$	mol

		$\text{CO}_2$	$\text{H}_2\text{S}$	$\rightleftharpoons$	$\text{COS}$	$\text{H}_2\text{O}$	
Cantidade inicial	$n_0$	0,100	0,299		0,00	0,00	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	$x$	$x$	$\rightarrow$	$x$	$x$	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$					0,0100	mol

$$[\text{CO}_2]_e = \frac{0,090 \text{ mol CO}_2}{2,00 \text{ dm}^3} = 0,045 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{H}_2\text{S}]_e = \frac{0,289 \text{ mol H}_2\text{S}}{2,00 \text{ dm}^3} = 0,145 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{COS}]_e = [\text{H}_2\text{O}]_e = \frac{0,010 \text{ mol}}{2,00 \text{ dm}^3} = 0,00500 \text{ mol/dm}^3$$

b) A expresión da constante de equilibrio en función das concentracións é:

$$K_c = \frac{[\text{H}_2\text{O}]_e \cdot [\text{COS}]_e}{[\text{H}_2\text{S}]_e \cdot [\text{CO}_2]_e} = \frac{0,00500 \text{ mol H}_2\text{O/dm}^3 \cdot 0,00500 \text{ mol COS/dm}^3}{0,145 \text{ mol H}_2\text{S/dm}^3 \cdot 0,045 \text{ mol CO}_2/\text{dm}^3} = 3,8 \cdot 10^{-3}$$

Como un dos factores (0,090 mol  $\text{CO}_2$ ) ten só dúas cifras significativas, a constante só pode ter dúas cifras significativas.

A relación entre  $K_p$  e  $K_c$  para esta reacción é

$$K_p = \frac{p_e(\text{H}_2\text{O}) \cdot p_e(\text{COS})}{p_e(\text{H}_2\text{S}) \cdot p_e(\text{CO}_2)} = \frac{\frac{n_e(\text{H}_2\text{O}) \cdot R \cdot T}{V} \cdot \frac{n_e(\text{COS}) \cdot R \cdot T}{V}}{\frac{n_e(\text{H}_2\text{S}) \cdot R \cdot T}{V} \cdot \frac{n_e(\text{CO}_2) \cdot R \cdot T}{V}} = \frac{[\text{H}_2\text{O}]_e \cdot [\text{COS}]_e}{[\text{H}_2\text{S}]_e \cdot [\text{CO}_2]_e} = K_c$$

Polo que

$$K_p = K_c = 3,8 \cdot 10^{-3}$$

5. Introdúcense 0,2 moles de  $\text{Br}_2$  nun recipiente de 0,5 L de capacidade a 600 °C. Unha vez establecido o equilibrio  $\text{Br}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{Br}(\text{g})$  nestas condicións, o grao de disociación é 0,8.

a) Calcula  $K_c$  e  $K_p$ .

b) Determina as presións parciais exercidas por cada compoñente da mestura no equilibrio.

Datos:  $R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

(A.B.A.U. extr. 17)

**Rta.:** a)  $K_c = 5,12$ ;  $K_p = 367$ ; b)  $p(\text{Br}_2) = 5,7 \text{ atm}$ ;  $p(\text{Br}) = 45,9 \text{ atm}$ .

#### Datos

Gas: volume  
temperatura

#### Cifras significativas: 3

$V = 0,500 \text{ dm}^3$   
 $T = 600 \text{ °C} = 873 \text{ K}$

**Datos**Cantidade inicial de Br<sub>2</sub>

Grao de disociación

Constante dos gases ideais

**Incógnitas**Constantes do equilibrio  $K_c$  e  $K_p$ 

Presións parciais exercida por cada compoñente

**Outros símbolos**Cantidade de Br<sub>2</sub> que se ha disociado**Ecuacións**

Concentración da substancia X

Grao de disociación

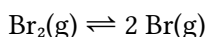
Constantes do equilibrio:  $a A + b B \rightleftharpoons c C + d D$ **Cifras significativas: 3** $n_0(\text{Br}_2) = 0,200 \text{ mol Br}_2$  $\alpha = 0,800$  $R = 0,0820 \text{ atm}\cdot\text{L}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$  $K_c, K_p$  $p(\text{Br}_2), p(\text{Br})$  $n_d(\text{Br}_2)$  $[X] = n(X) / V$ 

$$\alpha = \frac{n_d}{n_0}$$

$$K_c = \frac{[C]_e^c \cdot [D]_e^d}{[A]_e^a \cdot [B]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(C) \cdot p_e^d(D)}{p_e^a(A) \cdot p_e^b(B)}$$

**Solución:**

A ecuación de disociación química do bromo é:



Disociáronse:

$$n_d(\text{Br}_2) = \alpha \cdot n_0(\text{Br}_2) = 0,800 \cdot 0,200 [\text{mol Br}_2] = 0,160 \text{ mol Br}_2 \text{ disociados}$$

Pola estequiometría da reacción, as cantidades de bromo atómico formado e en equilibrio son:

		Br <sub>2</sub>	$\rightleftharpoons$	2 Br	
Cantidade inicial	$n_0$	0,200		0	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	0,160	$\rightarrow$	0,320	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$0,200 - 0,160 = 0,040$		0,320	mol
Concentración no equilibrio	$[X]_e$	$0,040 / 0,500 = 0,080$		0,640	mol/dm <sup>3</sup>

A expresión da constante de equilibrio en función das concentracións é:

$$K_c = \frac{[\text{Br}]_e^2}{[\text{Br}_2]_e} = \frac{(0,640)^2}{0,080} = 5,12 \text{ (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

Se consideramos comportamento ideal para os gases, podemos escribir:

$$K_p = \frac{p_e^2(\text{Br})}{p_e(\text{Br}_2)} = \frac{([\text{Br}]_e \cdot R \cdot T)^2}{[\text{Br}_2]_e \cdot R \cdot T} = \frac{[\text{Br}]_e^2}{[\text{Br}_2]_e} = K_c = \cdot R \cdot T = 5,12 \cdot 0,082 \cdot 873 = 367 \text{ (presións en atm)}$$

b) A presión parcial de cada un dos gases, suposto comportamento ideal, é a que exercería se se atopase só no recipiente.

$$p(\text{Br}) = \frac{n(\text{Br}) \cdot R \cdot T}{V_T} = \frac{0,640 \text{ mol} \cdot 8,31 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} \cdot 873 \text{ K}}{0,500 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3} = 4,65 \cdot 10^6 \text{ Pa} = 4650 \text{ kPa} \cdot \frac{1 \text{ atm}}{101,3 \text{ kPa}} = 45,9 \text{ atm}$$

$$p(\text{Br}_2) = \frac{n(\text{Br}_2) \cdot R \cdot T}{V_T} = \frac{0,080 \text{ mol} \cdot 8,31 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} \cdot 873 \text{ K}}{0,500 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3} = 5,8 \cdot 10^5 \text{ Pa} = 580 \text{ kPa} \cdot \frac{1 \text{ atm}}{101,3 \text{ kPa}} = 5,7 \text{ atm}$$

6. b) Nun matraz de 1,5 dm<sup>3</sup>, no que se fixo o baleiro, introdúcese 0,08 moles de N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> e quéntase a 35 °C. Parte do N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> disóciase segundo a reacción: N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(g) ⇌ 2 NO<sub>2</sub>(g) e cando se alcanza o equilibrio a presión total é de 2,27 atm. Calcula a porcentaxe de N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> disociado.

Datos:  $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ; 1 atm = 101,3 kPa.

(A.B.A.U. extr. 19)

**Rta.:** b)  $\alpha = 69 \%$ .

b)

### Datos

Volume

Temperatura

Cantidade inicial de tetraóxido de dinitróxeno

Presión no equilibrio

Constante dos gases ideais

### Cifras significativas: 3

$$V = 1,50 \text{ dm}^3 = 1,50 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$

$$T = 35 \text{ °C} = 308 \text{ K}$$

$$n_0(\text{N}_2\text{O}_4) = 0,0800 \text{ mol}$$

$$p = 2,27 \text{ atm} \cdot 1,013 \cdot 10^5 \text{ Pa/atm} = 2,30 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

### Incógnitas

Porcentaxe de N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> disociado

$\alpha$

### Ecuacións

Concentración da substancia X

$$[X] = n(X) / V$$

Ecuación de estado dos gases ideais

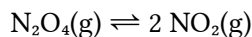
$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow p = \frac{n \cdot R \cdot T}{V}$$

Constante do equilibrio:  $a A + b B \rightleftharpoons c C + d D$

$$K_c = \frac{[C]_e^c \cdot [D]_e^d}{[A]_e^a \cdot [B]_e^b}$$

### Solución:

b) A ecuación química é:



Chamando  $x$  á cantidade de N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> que se disocia ata chegar ao equilibrio, pódese escribir:

		N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	⇌	2 NO <sub>2</sub>	
Cantidade inicial	$n_0$	0,0800		0	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	$x$	→	$2x$	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$0,0800 - x$		$2x$	mol

A cantidade total de gas no equilibrio será

$$n_t = 0,0800 - x + 2x = 0,0800 + x$$

Por outra banda, pódese calcular a cantidade de gas a partir da presión total

$$n_t = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{2,30 \cdot 10^5 \text{ Pa} \cdot 1,50 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3}{8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 308 \text{ K}} = 0,135 \text{ mol gas}$$

Despexando

$$x = 0,135 - 0,080 = 0,055 \text{ mol de N}_2\text{O}_4 \text{ que se disocian}$$

A porcentaxe de N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> disociado é:

$$\alpha = \frac{n_r}{n_0} = \frac{0,055}{0,080} = 0,69 = 69 \%$$

7. Nun reactor de 10 L introdúcese 2,5 moles de PCl<sub>5</sub> e quéntase ata 270 °C, producíndose a reacción: PCl<sub>5</sub>(g) ⇌ PCl<sub>3</sub>(g) + Cl<sub>2</sub>(g). Unha vez alcanzado o equilibrio compróbase que a presión no reactor é de 15,7 atm. Calcula:

a) O número de moles de todas as especies presentes no equilibrio.



b) O valor das constantes  $K_c$  e  $K_p$  a devandita temperatura.

Datos:  $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $1 \text{ atm} = 101,3 \text{ kPa}$ .

(A.B.A.U. ord. 18)

Rta.: a)  $n(\text{PCl}_5) = 1,48 \text{ mol PCl}_5$ ;  $n(\text{PCl}_3) = n(\text{Cl}_2) = 1,02 \text{ mol}$ ; b)  $K_c = 0,0708$ ;  $K_p = 3,15$ .

### Datos

Cantidade inicial de  $\text{PCl}_5$

Gas: volume

temperatura

Presión total no equilibrio

Constante dos gases ideais

### Incógnitas

Concentracións de cada especie no equilibrio

Constantes de equilibrio

### Outros símbolos

Cantidade da substancia X no equilibrio

### Ecuacións

Concentración da substancia X

Ecuación de estado dos gases ideais

Constantes do equilibrio:  $a \text{ A} + b \text{ B} \rightleftharpoons c \text{ C} + d \text{ D}$

### Cifras significativas: 3

$n_0(\text{PCl}_5) = 2,50 \text{ mol}$

$V = 10,0 \text{ dm}^3$

$t = 270 \text{ }^\circ\text{C} = 543 \text{ K}$

$p = 15,7 \text{ atm}$

$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$

$[\text{PCl}_5]$ ,  $[\text{PCl}_3]$ ,  $[\text{Cl}_2]$

$K_c$ ,  $K_p$

$n_e(\text{X})$

$[\text{X}] = n(\text{X}) / V$

$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$

$K_c = \frac{[\text{C}]_e^c \cdot [\text{D}]_e^d}{[\text{A}]_e^a \cdot [\text{B}]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(\text{C}) \cdot p_e^d(\text{D})}{p_e^a(\text{A}) \cdot p_e^b(\text{B})}$

### Solución:

a) Supoñendo comportamento ideal para os gases:

$$n_{e,t} = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{15,7 \text{ atm} \cdot 10,0 \text{ L}}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 543 \text{ K}} = 3,52 \text{ mol de gases no equilibrio}$$

A ecuación de disociación é:



Chámase  $x$  á cantidade de  $\text{PCl}_5$  disociada. Pola estequiometría da reacción,

		$\text{PCl}_5$	$\rightleftharpoons$	$\text{PCl}_3$	$\text{Cl}_2$	
Cantidade inicial	$n_0$	$n_0$		0	0	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	$x$	$\rightarrow$	$x$	$x$	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$n_0 - x$		$x$	$x$	mol

A cantidade de gas que hai no equilibrio é:  $n_{e,t} = n_0 - x + x + x = n_0 + x$

Comparando co resultado anterior,

$$3,52 = 2,50 + x$$

$$x = 3,52 - 2,50 = 1,02 \text{ mol disociados}$$

As cantidades no equilibrio serán:

$$n_e(\text{PCl}_5) = n_0 - x = 2,50 - 1,02 = 1,48 \text{ mol PCl}_5 \text{ no equilibrio}$$

$$n_e(\text{Cl}_2) = n_e(\text{PCl}_3) = x = 1,02 \text{ mol}$$

E as concentracións serán:

$$[\text{PCl}_5]_e = 1,48 \text{ mol PCl}_5 / 10,0 \text{ dm}^3 = 0,148 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{Cl}_2]_e = [\text{PCl}_3]_e = 1,02 \text{ mol}/10,0 \text{ dm}^3 = 0,102 \text{ mol/dm}^3$$

b) A constante de equilibrio en función das concentracións é

$$K_c = \frac{[\text{PCl}_3]_e \cdot [\text{Cl}_2]_e}{[\text{PCl}_5]_e} = \frac{0,102 \cdot 0,102}{0,148} = 0,070 \quad \text{ε (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

A constante de equilibrio en función das presións é

$$K_p = \frac{p_e(\text{PCl}_3) \cdot p_e(\text{Cl}_2)}{p_e(\text{PCl}_5)} = \frac{[\text{PCl}_3]_e \cdot R \cdot T [\text{Cl}_2]_e \cdot R \cdot T}{[\text{PCl}_5]_e \cdot R \cdot T} = \frac{[\text{PCl}_3]_e \cdot [\text{Cl}_2]_e}{[\text{PCl}_5]_e} \cdot R \cdot T = K_c \cdot R \cdot T$$

$$K_p = K_c \cdot R \cdot T = 0,0708 \cdot 0,082 \cdot 543 = 3,15 \quad \text{(presións en atm)}$$

8. Nun recipiente pechado de 5 dm<sup>3</sup>, no que previamente se fixo o baleiro, introdúcese 0,4 moles de SO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> e quéntase a 400 °C, descompoñéndose segundo a reacción: SO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>(g) ⇌ SO<sub>2</sub>(g) + Cl<sub>2</sub>(g). Cando se alcanza o equilibrio, obsérvase que se descompuxo o 36,5 % do SO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> inicial. Calcula:

a) As presións parciais de cada compoñente da mestura no equilibrio.

b) O valor de K<sub>c</sub> e K<sub>p</sub> á devandita temperatura.

Dato: R = 0,082 atm·dm<sup>3</sup>·K<sup>-1</sup>·mol<sup>-1</sup> = 8,31 J·K<sup>-1</sup>·mol<sup>-1</sup>.

(A.B.A.U. ord. 22)

**Rta.:** a) a) p(SO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) = 2,81 atm; p(SO<sub>2</sub>) = p(Cl<sub>2</sub>) = 1,61 atm; b) K<sub>c</sub> = 0,0168; K<sub>p</sub> = 0,927.

### Datos

Gas: volume

temperatura

Cantidade inicial de SO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

Grao de disociación

Constante dos gases ideais

### Incógnitas

Presións parciais de cada especie no equilibrio

Constantes de equilibrio

### Outros símbolos

Concentración dunha especie X

Cantidade da substancia X no equilibrio

### Ecuacións

Lei de Dalton das presións parciais

Concentración da substancia X

Ecuación de estado dos gases ideais

Grao de disociación

Constantes do equilibrio: a A + b B ⇌ c C + d D

### Cifras significativas: 3

$$V = 5,00 \text{ dm}^3$$

$$T = 400 \text{ °C} = 673 \text{ K}$$

$$n_0 = 0,400 \text{ mol}$$

$$\alpha = 36,5 \% = 0,365$$

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$p(\text{SO}_2\text{Cl}_2), p(\text{SO}_2), p(\text{Cl}_2)$$

$$K_c, K_p$$

$$[X]$$

$$n_e(X)$$

$$p_t = \sum p_i$$

$$[X] = n(X) / V$$

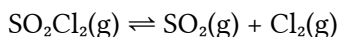
$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

$$\alpha = \frac{n_d}{n_0}$$

$$K_c = \frac{[\text{C}]_e^c \cdot [\text{D}]_e^d}{[\text{A}]_e^a \cdot [\text{B}]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(\text{C}) \cdot p_e^d(\text{D})}{p_e^a(\text{A}) \cdot p_e^b(\text{B})}$$

### Solución:

a) A ecuación de disociación é:



Como o grao de disociación é:

$$\alpha = \frac{n_d}{n_0}$$

A cantidade de  $\text{SO}_2\text{Cl}_2$  disociada será:

$$n_d = \alpha \cdot n_0 = 0,365 \cdot 0,400 = 0,146 \text{ mol } \text{SO}_2\text{Cl}_2 \text{ disociados.}$$

Coa estequiometría da reacción, calcúlanse as cantidades de cada gas no equilibrio.

		$\text{SO}_2\text{Cl}_2$	$\rightleftharpoons$	$\text{SO}_2$	$\text{Cl}_2$	
Cantidade inicial	$n_0$	0,400		0	0	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	0,146	$\rightarrow$	0,146	0,146	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$0,400 - 0,146 = 0,254$		0,146	0,146	mol

As concentracións serán:

$$[\text{SO}_2\text{Cl}_2]_e = 0,254 \text{ mol } \text{SO}_2\text{Cl}_2 / 5,00 \text{ dm}^3 = 0,0508 \text{ mol / dm}^3$$

$$[\text{Cl}_2]_e = [\text{SO}_2]_e = 0,146 \text{ mol / 5,00 dm}^3 = 0,0292 \text{ mol / dm}^3$$

Supoñendo comportamento ideal para os gases, as presións parciais valerán:

$$p(\text{SO}_2\text{Cl}_2) = \frac{n(\text{SO}_2\text{Cl}_2) \cdot R \cdot T}{V} = [\text{SO}_2\text{Cl}_2] \cdot R \cdot T = 0,0508 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 673 \text{ K} = 2,81 \text{ atm}$$

$$p(\text{Cl}_2) = p(\text{SO}_2) = \frac{n(\text{Cl}_2) \cdot R \cdot T}{V} = [\text{Cl}_2] \cdot R \cdot T = 0,0292 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 673 \text{ K} = 1,61 \text{ atm}$$

a) A constante de equilibrio en función das concentracións é:

$$K_c = \frac{[\text{SO}_2]_e \cdot [\text{Cl}_2]_e}{[\text{SO}_2\text{Cl}_2]_e} = \frac{0,0292 \cdot 0,0292}{0,0508} = 0,016 \quad \epsilon \text{ (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

A constante de equilibrio en función das presións é

$$K_p = \frac{p_e(\text{SO}_2) \cdot p_e(\text{Cl}_2)}{p_e(\text{SO}_2\text{Cl}_2)} = \frac{[\text{SO}_2]_e \cdot R \cdot T [\text{Cl}_2]_e \cdot R \cdot T}{[\text{SO}_2\text{Cl}_2]_e \cdot R \cdot T} = \frac{[\text{SO}_2]_e \cdot [\text{Cl}_2]_e}{[\text{SO}_2\text{Cl}_2]_e} \cdot R \cdot T = K_c \cdot R \cdot T$$

$$K_p = K_c \cdot R \cdot T = 0,0168 \cdot 0,082 \cdot 673 = 0,927 \text{ (presións en atm)}$$

9. Nun recipiente pechado introdúcese 2,0 moles de  $\text{CH}_4$  e 1,0 mol de  $\text{H}_2\text{S}$  á temperatura de  $727^\circ\text{C}$ , establecéndose o seguinte equilibrio:  $\text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{S}(\text{g}) \rightleftharpoons \text{CS}_2(\text{g}) + 4 \text{H}_2(\text{g})$ . Una vez alcanzado o equilibrio, a presión parcial do  $\text{H}_2$  é 0,20 atm e a presión total é de 0,85 atm. Calcule:

a) Os moles de cada substancia no equilibrio e o volume do recipiente.

b) O valor de  $K_c$  e  $K_p$ .

Dato:  $R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

(A.B.A.U. ord. 20)

**Rta.:** a)  $n_e(\text{CH}_4) = 1,80 \text{ mol}$ ;  $n_e(\text{H}_2\text{S}) = 0,60 \text{ mol}$ ;  $n_e(\text{CS}_2) = 0,200 \text{ mol}$ ;  $n_e(\text{H}_2) = 0,800 \text{ mol}$ ;  $V = 328 \text{ dm}^3$ ;

b)  $K_p = 0,0079$ ;  $K_c = 1,2 \cdot 10^{-6}$ .

### Datos

Temperatura

Cantidade inicial de metano

Cantidade inicial de sulfuro de hidróxeno

Presión parcial do hidróxeno no equilibrio

Presión total no equilibrio

Constante dos gases ideais

### Incógnitas

Cantidade no equilibrio de cada substancia

### Cifras significativas: 3

$$T = 727^\circ\text{C} = 1000 \text{ K}$$

$$n_0(\text{CH}_4) = 2,00 \text{ mol } \text{CH}_4$$

$$n_0(\text{H}_2\text{S}) = 1,00 \text{ mol } \text{H}_2\text{S}$$

$$p_e(\text{H}_2) = 0,200 \text{ atm}$$

$$p_e = 0,850 \text{ atm}$$

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$n_e(\text{CH}_4), n_e(\text{H}_2\text{S}), n_e(\text{CS}_2), n_e(\text{H}_2)$$

**Incógnitas**

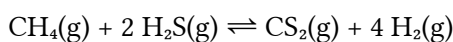
Volume do recipiente	$V$
Constante do equilibrio $K_c$	$K_c$
Constante do equilibrio $K_p$	$K_p$

**Ecuacións**

Ecuación de estado dos gases ideais	$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow p = \frac{n \cdot R \cdot T}{V}$
Concentración da substancia X	$[X] = n(X) / V$
Constantes do equilibrio: $a A + b B \rightleftharpoons c C + d D$	$K_c = \frac{[C]_e^c \cdot [D]_e^d}{[A]_e^a \cdot [B]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(C) \cdot p_e^d(D)}{p_e^a(A) \cdot p_e^b(B)}$

**Solución:**

a) A ecuación química é:



Chamando  $x$  á cantidade de metano que reaccionou ata acadar o equilibrio podemos escribir

		$\text{CH}_4$	$2 \text{H}_2\text{S}$	$\rightleftharpoons$	$\text{CS}_2$	$4 \text{H}_2$	
Cantidade inicial	$n_0$	2,00	1,00		0,0	0,0	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	$x$	$2x$		$x$	$4x$	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$2,00 - x$	$1,00 - 2x$		$x$	$4x$	mol

No equilibrio haberá en total:

$$n_e = (2,00 - x) + (1,00 - 2x) + x + 4x = 3,00 + 2x$$

Da presión parcial do hidróxeno podemos deducir:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow n_e(\text{H}_2) = \frac{p_e(\text{H}_2) \cdot V}{R \cdot T} = \frac{0,200 \text{ atm} \cdot V}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 1000 \text{ K}} = 0,00244 \cdot V \text{ mol H}_2$$

$$4x = 0,0244 \cdot V$$

Da presión total podemos deducir:

$$n_e = \frac{p_e \cdot V}{R \cdot T} = \frac{0,850 \text{ atm} \cdot V}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 1000 \text{ K}} = 0,0104V \text{ mol}$$

$$3,00 + 2x = 0,104 \cdot V$$

Do sistema de dúas ecuacións con dúas incógnitas,

$$\left. \begin{array}{l} 4x = 0,00244 \cdot V \\ 3,00 + 2x = 0,104 \cdot V \end{array} \right\}$$

deducimos o volume  $V$  do recipiente e a cantidade  $x$  de metano que reaccionou ata acadar o equilibrio.

$$\frac{3,00 + 2x}{4x} = \frac{0,0104V}{0,00244 \cdot V} = 4,25$$

$$3,00 + 2x = 17,0x$$

$$x = 0,200 \text{ mol}$$

$$V = 328 \text{ dm}^3$$

As cantidades das substancias no equilibrio son:

$$n_e(\text{CH}_4) = 2,00 - x = 2,00 - 0,200 = 1,80 \text{ mol CH}_4$$

$$n_e(\text{H}_2\text{S}) = 1,00 - 2x = 1,00 - 2 \cdot 0,200 = 0,60 \text{ mol H}_2\text{S}$$

$$n_e(\text{CS}_2) = x = 0,200 \text{ mol CS}_2$$

$$n_e(\text{H}_2) = 4 \cdot x = 0,800 \text{ mol H}_2$$

A constante de equilibrio en función das concentracións é:

$$K_c = \frac{[\text{CS}_2]_e \cdot [\text{H}_2\text{S}]_e^4}{[\text{CH}_4]_e \cdot [\text{H}_2\text{S}]_e^2} = \frac{\frac{n_e(\text{CS}_2)}{V} \cdot \left(\frac{n_e(\text{H}_2)}{V}\right)^4}{\frac{n_e(\text{CH}_4)}{V} \cdot \left(\frac{n_e(\text{H}_2\text{S})}{V}\right)^2} = \frac{n_e(\text{CS}_2) \cdot n_e^4(\text{H}_2)}{n_e(\text{CH}_4) \cdot n_e^2(\text{H}_2\text{S})} \cdot \frac{1}{V^2} = \frac{0,200 \cdot 0,800^4}{1,80 \cdot 0,60^2} \cdot \frac{1}{328^2} = 1,2 \cdot 10^{-6}$$

(concentracións en mol/dm<sup>3</sup>)

Se consideramos comportamento ideal para os gases, podemos escribir:

$$K_p = \frac{p_e(\text{CS}_2) \cdot p_e^4(\text{H}_2)}{p_e(\text{CH}_4) \cdot p_e^2(\text{H}_2\text{S})} = \frac{[\text{CS}_2]_e \cdot R \cdot T \cdot ([\text{H}_2]_e \cdot R \cdot T)^4}{[\text{CH}_4]_e \cdot R \cdot T \cdot ([\text{H}_2\text{S}]_e \cdot R \cdot T)^2} = \frac{[\text{CS}_2]_e \cdot ([\text{H}_2]_e)^4}{[\text{CH}_4]_e \cdot ([\text{H}_2\text{S}]_e)^2} \cdot (R \cdot T)^2 = K_c \cdot (R \cdot T)^2$$

$$K_p = 1,2 \cdot 10^{-6} \cdot (0,082 \cdot 1000)^2 = 0,007 \quad \text{(presións en atm)}$$

10. Ao quentar HgO(s) nun recipiente pechado no que se fixo o baleiro, disóciase segundo a reacción:  
 $2 \text{HgO(s)} \rightleftharpoons 2 \text{Hg(g)} + \text{O}_2\text{(g)}$ . Cando se alcanza o equilibrio a 380 °C, a presión total no recipiente é de 0,185 atm. Calcula:

a) As presións parciais das especies presentes no equilibrio.

b) O valor das constantes  $K_c$  e  $K_p$  da reacción.

Datos:  $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ; 1 atm = 101,3 kPa.

(A.B.A.U. extr. 18)

**Rta.:** a)  $p(\text{Hg}) = 0,123 \text{ atm}$ ;  $p(\text{O}_2) = 0,0617 \text{ atm}$ ; b)  $K_c = 6,1 \cdot 10^{-9}$ ;  $K_p = 9,4 \cdot 10^{-4}$ .

### Datos

Temperatura

Presión total no equilibrio

Constante dos gases ideais

### Cifras significativas: 3

$$t = 380 \text{ °C} = 653 \text{ K}$$

$$p = 0,185 \text{ atm}$$

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

### Incógnitas

Presións parciais das especies no equilibrio

Constantes de equilibrio

$$p(\text{HgO}), p(\text{Hg}), p(\text{O}_2)$$

$$K_c, K_p$$

### Outros símbolos

Cantidade da substancia X no equilibrio

$$n_e(\text{X})$$

### Ecuacións

Concentración da substancia X

$$[\text{X}] = n(\text{X}) / V$$

Ecuación dos gases ideais

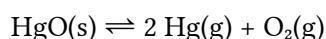
$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \Rightarrow p_i = [i] \cdot R \cdot T$$

Constantes do equilibrio:  $a \text{ A} + b \text{ B} \rightleftharpoons c \text{ C} + d \text{ D}$

$$K_c = \frac{[\text{C}]_e^c \cdot [\text{D}]_e^d}{[\text{A}]_e^a \cdot [\text{B}]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(\text{C}) \cdot p_e^d(\text{D})}{p_e^a(\text{A}) \cdot p_e^b(\text{B})}$$

### Solución:

a) A ecuación de disociación é:



		HgO	$\rightleftharpoons$	Hg	O <sub>2</sub>	
Cantidade inicial	$n_0$	$n_0$		0	0	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	$x$	$\rightarrow$	$2x$	$x$	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$n_0 - x$		$2x$	$x$	mol

No equilibrio a presión total é a suma das presións parciais dos gases Hg e O<sub>2</sub>. A presión do Hg é o dobre que a presión de O<sub>2</sub>. Chamando y á presión do osíxeno, queda:

$$\begin{aligned} p &= p(\text{Hg}) + p(\text{O}_2) \\ 0,185 &= 2 \cdot y + y = 3y \\ y &= 0,0617 \text{ atm} \end{aligned}$$

E as presións serán:

$$\begin{aligned} p(\text{O}_2) &= 0,0617 \text{ atm} \\ p(\text{Hg}) &= 0,123 \text{ atm} \end{aligned}$$

A presión do HgO é nula, pois non é un gas.

b) A constante de equilibrio en función das presións é

$$K_p = p_c^2(\text{Hg}) \cdot p_c(\text{O}_2) = 0,123^2 \cdot 0,0617 = 9,38 \cdot 10^{-4} \text{ (presións en atm)}$$

A constante de equilibrio en función das concentracións é

$$K_c = [\text{Hg}]_c^2 \cdot [\text{O}_2]_c = \left( \frac{p_c(\text{Hg})}{R \cdot T} \right)^2 \cdot \frac{p_c(\text{O}_2)}{R \cdot T} = \frac{K_p}{(R \cdot T)^3} = \frac{9,38 \cdot 10^{-4}}{(0,082 \cdot 653)^3} = 6,1 \cdot 10^{-9} \text{ (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

### ● Coa constante como dato

- Para a reacción  $\text{CO(g)} + \text{H}_2\text{O(g)} \rightleftharpoons \text{CO}_2\text{(g)} + \text{H}_2\text{(g)}$ , o valor de  $K_c = 5$  a 530 °C. Se reaccionan 2,0 moles de CO(g) con 2,0 moles de H<sub>2</sub>O(g) nun reactor de 2 L:
  - Calcula a concentración molar de cada especie no equilibrio á devandita temperatura.
  - Determina o valor de  $K_p$  e razoa como se verá afectado o equilibrio se introducimos no reactor máis cantidade de CO(g) sen variar a temperatura nin o volume.

(A.B.A.U. extr. 23)

**Rta.:** a)  $[\text{CO}] = 0,309$ ;  $[\text{H}_2\text{O}] = 0,309$ ;  $[\text{CO}_2] = 0,691$ ;  $[\text{H}_2] = 0,691 \text{ mol/dm}^3$ ; b)  $K_p = 5,00$ .

#### **Datos**

Constante de equilibrio

Temperatura

Cantidade inicial de CO

Concentración inicial de H<sub>2</sub>O

Volume

#### **Cifras significativas: 2**

$$K_c = 5,0$$

$$T = 530 \text{ °C} = 803 \text{ K}$$

$$n_0(\text{CO}) = 2,0 \text{ mol CO}$$

$$n_0(\text{H}_2\text{O}) = 2,0 \text{ mol H}_2\text{O}$$

$$V = 2,0 \text{ dm}^3$$

#### **Incógnitas**

Concentracións no equilibrio

Constante de equilibrio en función das presións

$$[\text{H}_2]_e, [\text{CO}_2]_e, [\text{H}_2\text{O}]_e, [\text{CO}]_e$$

$$K_p$$

#### **Ecuacións**

Concentración da substancia X

$$[\text{X}] = n(\text{X}) / V$$

Constantes do equilibrio:  $a \text{ A} + b \text{ B} \rightleftharpoons c \text{ C} + d \text{ D}$

$$K_c = \frac{[\text{C}]_c^c \cdot [\text{D}]_c^d}{[\text{A}]_c^a \cdot [\text{B}]_c^b} \quad K_p = \frac{p_c^c(\text{C}) \cdot p_c^d(\text{D})}{p_c^a(\text{A}) \cdot p_c^b(\text{B})}$$

#### **Solución:**

a) As concentracións iniciais son:

$$[\text{H}_2\text{O}]_0 = [\text{CO}]_0 = 2,0 \text{ mol} / 2 \text{ dm}^3 = 1 \text{ mol/dm}^3$$

Chamando  $x$  ás concentracións en mol/dm<sup>3</sup> de CO que reaccionan pódese escribir:

		CO	H <sub>2</sub> O	⇌	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	
Concentración inicial	[X] <sub>0</sub>	1,0	1,0		0	0	mol/dm <sup>3</sup>
Concentración que reacciona ou se forma	[X] <sub>r</sub>	$x$	$x$	→	$x$	$x$	mol/dm <sup>3</sup>
Concentración no equilibrio	[X] <sub>eb</sub>	$1,0 - x$	$1,0 - x$		$x$	$x$	mol/dm <sup>3</sup>

A expresión da constante de equilibrio en función das concentracións é:

$$K_c = \frac{[\text{CO}_2]_e \cdot [\text{H}_2]_e}{[\text{H}_2\text{O}]_e \cdot [\text{CO}]_e} = \frac{x \cdot x}{(1,0 - x) \cdot (1,0 - x)} = 5,0$$

Resolvendo a ecuación de segundo grao dá dúas solucións.

$$\frac{x}{(1,0 - x)} = \pm \sqrt{5,0} = \pm 2,2$$

$$x = \pm 2,2 (1,0 - x)$$

$$x + 2,2 x = 2,2 \Rightarrow x = 2,2 / 3,2 = 0,69$$

$$x - 2,2 x = 2,2 \Rightarrow x = -2,2 / 1,2 = -1,8$$

Unha delas (-1,8) non é válida, xa que supoñería a existencia de concentracións negativas no equilibrio. A outra solución é  $x = 0,69$  mol/dm<sup>3</sup>.

As concentracións no equilibrio son:

$$[\text{CO}_2]_e = [\text{H}_2]_e = 0,69 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{CO}]_e = [\text{H}_2\text{O}]_e = 1,0 - 0,69 = 0,3 \text{ mol/dm}^3$$

b) A constante de equilibrio en función das presións será:

$$K_p = \frac{p_e(\text{CO}_2) \cdot p_e(\text{H}_2)}{p_e(\text{H}_2\text{O}) \cdot p_e(\text{CO})} = \frac{\left(\frac{n_e(\text{CO}_2) \cdot R \cdot T}{V}\right) \cdot \left(\frac{n_e(\text{H}_2) \cdot R \cdot T}{V}\right)}{\left(\frac{n_e(\text{H}_2\text{O}) \cdot R \cdot T}{V}\right) \cdot \left(\frac{n_e(\text{CO}) \cdot R \cdot T}{V}\right)} = \frac{[\text{CO}_2]_e \cdot [\text{H}_2]_e}{[\text{H}_2\text{O}]_e \cdot [\text{CO}]_e} \cdot \frac{R \cdot T \cdot R \cdot T}{R \cdot T \cdot R \cdot T} = K_c = 5,0$$

A constante de equilibrio só depende da temperatura. Non varía aínda que cambien as cantidades de reactivos ou produtos, ou diminúa o volume.

Se se aumenta a cantidade de monóxido de carbono, para que  $K_c$  permaneza constante, ou ben deberá aumentar o numerador  $n_e(\text{CO}_2)$  e  $n_e(\text{H}_2)$ , ou diminuír a cantidade de auga no denominador  $n_e(\text{H}_2\text{O})$ . O equilibrio desprazarase (cara á dereita) ata alcanzar un novo estado de equilibrio no que haberá máis CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> e menos H<sub>2</sub>O.

2. Nun recipiente de 10 litros introdúcese 2 moles de N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> gasoso a 50 °C producíndose o seguinte equilibrio de disociación: N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(g) ⇌ 2 NO<sub>2</sub>(g). Se a constante  $K_p$  a devandita temperatura é de 1,06; calcula:

- a) As concentracións dos dous gases tras alcanzar o equilibrio e a porcentaxe de disociación do N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>.  
b) As presións parciais de cada gas e a presión total no equilibrio.

Datos:  $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ; 1 atm = 101,3 kPa.

(A.B.A.U. extr. 21)

**Rta.:** a)  $[\text{N}_2\text{O}_4] = 0,160 \text{ mol/dm}^3$ ;  $[\text{NO}_2] = 0,0800 \text{ mol/dm}^3$ ;  $\alpha = 20,0 \%$ ;

b)  $p(\text{N}_2\text{O}_4) = 4,24 \text{ atm} = 430 \text{ kPa}$ ;  $p(\text{NO}_2) = 2,12 \text{ atm} = 215 \text{ kPa}$ ;  $p = 6,36 \text{ atm} = 645 \text{ kPa}$ .

### Datos

Gas: volume

temperatura

Cantidade inicial de tetraóxido de dinitróxeno

Constante de equilibrio (en función das presións en atm)

### Cifras significativas: 3

$$V = 10,0 \text{ dm}^3$$

$$T = 50 \text{ °C} = 323 \text{ K}$$

$$n_0(\text{N}_2\text{O}_4) = 2,00 \text{ mol N}_2\text{O}_4$$

$$K_c = 1,06$$

**Datos**

Constante dos gases ideais

**Incógnitas**

Concentracións dos dous gases no equilibrio

Presión parcial de cada gas e presión total no equilibrio

**Ecuacións**

Lei de Dalton das presións parciais

Concentración da substancia X

Grao de disociación

Ecuación de estado dos gases ideais

Constante do equilibrio:  $a A + b B \rightleftharpoons c C + d D$ **Cifras significativas: 3**

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$[\text{N}_2\text{O}_4]_e, [\text{NO}_2]_e$$

$$p_e(\text{N}_2\text{O}_4), p_e(\text{NO}_2), p_t$$

$$p_t = \sum p_i$$

$$[\text{X}] = n(\text{X}) / V$$

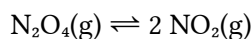
$$\alpha = \frac{n_d}{n_0}$$

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

$$K_c = \frac{[\text{C}]_e^c \cdot [\text{D}]_e^d}{[\text{A}]_e^a \cdot [\text{B}]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(\text{C}) \cdot p_e^d(\text{D})}{p_e^a(\text{A}) \cdot p_e^b(\text{B})}$$

**Solución:**

b) A ecuación química é:



A ecuación da constante de equilibrio en función das presións (en atm) é:

$$K_p = \frac{p_e^2(\text{NO}_2)}{p_e(\text{N}_2\text{O}_4)}$$

Supoñendo comportamento ideal para os gases, a presión vén dada por:

$$p = \frac{n \cdot R \cdot T}{V}$$

A presión inicial do tetraóxido de dinitróxeno é:

$$p(\text{N}_2\text{O}_4) = \frac{2,00 \text{ mol N}_2\text{O}_4 \cdot 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 323 \text{ K}}{10,0 \text{ dm}^3} = 5,30 \text{ atm}$$

Chámase  $x$  á presión de tetraóxido de dinitróxeno que se transforma en dióxido de nitróxeno. Pola estequiometría da reacción,

		$\text{N}_2\text{O}_4$	$\rightleftharpoons$	$2 \text{NO}_2$	
Presión inicial	$p_0$	5,30		0	atm
Presión que reacciona ou se forma	$p_r$	$x$		$2x$	atm
Presión no equilibrio	$p_e$	$5,30 - x$		$2x$	atm

$$x = 1,06 \text{ atm}$$

As presións parciais serían:

$$p_e(\text{NO}_2) = 2x = 2,12 \text{ atm}$$

$$p_e(\text{N}_2\text{O}_4) = 5,30 - x = 5,30 - 1,06 = 4,24 \text{ atm}$$

E a presión total obtense pola lei de Dalton:

$$p_{t\ e} = p(\text{NO}_2) + p(\text{N}_2\text{O}_4) = 2,12 + 4,24 = 6,36 \text{ atm}$$

a) A concentración obtense da ecuación dos gases ideais:



$$p = \frac{n \cdot R \cdot T}{V} \Rightarrow \frac{n}{V} = \frac{p}{R \cdot T}$$

$$[\text{NO}_2]_e = \frac{2,12 \text{ atm}}{0,082 \cdot \text{atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 323 \text{ K}} = 0,080 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{N}_2\text{O}_4]_e = \frac{4,24 \text{ atm}}{0,082 \cdot \text{atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 323 \text{ K}} = 0,160 \text{ mol/dm}^3$$

O grao de disociación é:

$$\alpha = \frac{n_d}{n_0} = \frac{p_d}{p_0} = \frac{1,06}{5,30} = 0,200 = 20 \%$$

3. Considera o seguinte equilibrio que ten lugar a 150 °C:  $\text{I}_2(\text{g}) + \text{Br}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{IBr}(\text{g})$  cunha  $K_c = 120$ . Nun recipiente de 5,0 dm<sup>3</sup> de capacidade introdúcese 0,0015 moles de iodo e 0,0015 moles de bromo. Calcula:

a) A concentración de cada especie cando se alcanza o equilibrio.

b) As presións parciais e a constante  $K_p$ .

Datos:  $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ; 1 atm = 101,3 kPa.

(A.B.A.U. ord. 21)

**Rta.:** a)  $[\text{I}_2] = [\text{Br}_2] = 4,63 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$ ;  $[\text{IBr}] = 5,07 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$ ;

b)  $p(\text{I}_2) = p(\text{Br}_2) = 163 \text{ Pa} = 0,00161 \text{ atm}$ ;  $p(\text{IBr}) = 1,79 \cdot 10^3 \text{ Pa} = 0,0176 \text{ atm}$ ;  $K_p = 120$ .

### Datos

Gas: volume

temperatura

Cantidade inicial de iodo

Cantidade inicial de bromo

Constante de equilibrio (en función das concentracións)

Constante dos gases ideais

### Cifras significativas: 3

$$V = 5,00 \text{ dm}^3$$

$$T = 150 \text{ °C} = 423 \text{ K}$$

$$n_0(\text{I}_2) = 0,00150 \text{ mol I}_2$$

$$n_0(\text{Br}_2) = 0,00150 \text{ mol Br}_2$$

$$K_c = 120$$

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

### Incógnitas

Concentración de cada especie no equilibrio

$$[\text{I}_2]_e, [\text{Br}_2]_e, [\text{IBr}]_e$$

Presión parcial de cada gas no equilibrio

$$p(\text{I}_2), p(\text{Br}_2), p(\text{IBr})$$

Constante de equilibrio en función das presións

$$K_p$$

### Ecuacións

Lei de Dalton das presións parciais

$$p_t = \sum p_i$$

Concentración da substancia X

$$[\text{X}] = n(\text{X}) / V$$

Ecuación de estado dos gases ideais

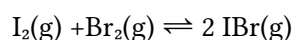
$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

Constantes do equilibrio:  $a \text{ A} + b \text{ B} \rightleftharpoons c \text{ C} + d \text{ D}$

$$K_c = \frac{[\text{C}]_e^c \cdot [\text{D}]_e^d}{[\text{A}]_e^a \cdot [\text{B}]_e^b} \quad K_p = \frac{p_e^c(\text{C}) \cdot p_e^d(\text{D})}{p_e^a(\text{A}) \cdot p_e^b(\text{B})}$$

### Solución:

a) A ecuación química é:



Chámase  $x$  á cantidade de iodo que se transforma en bromuro de iodo. Pola estequiometría da reacción,

		$\text{I}_2$	$\text{Br}_2$	$\rightleftharpoons$	$2 \text{IBr}$	
Cantidade inicial	$n_0$	0,00150	0,00150		0	mol

		I <sub>2</sub>	Br <sub>2</sub>	⇌	2 IBr	
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	$x$	$x$		$2x$	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$0,00150 - x$	$0,00150 - x$		$2x$	mol

A ecuación da constante de equilibrio é:

$$K_c = \frac{[\text{IBr}]_e^2}{[\text{I}_2]_e \cdot [\text{Br}_2]_e}$$

A concentración en mol·dm<sup>-3</sup> obtense dividindo a cantidade entre o volume (en dm<sup>3</sup>):

$$K_c = 120 = \frac{\left(\frac{n_e(\text{IBr})}{V}\right)^2}{\left(\frac{n_e(\text{I}_2)}{V}\right) \cdot \left(\frac{n_e(\text{Br}_2)}{V}\right)} = \frac{\left(\frac{2x}{5,00}\right)^2}{\left(\frac{0,00150-x}{5,00}\right) \left(\frac{0,00150-x}{5,00}\right)} = \frac{(2x)^2}{(0,00150-x)^2}$$

$$\pm \sqrt{120} = \frac{2x}{0,00150-x} = \pm 11,0$$

$$x = 0,00127 \text{ mol}$$

As cantidades no equilibrio serán:

$$n_e(\text{IBr}) = 2x = 0,00254 \text{ mol IBr}$$

$$n_e(\text{Br}_2) = n_e(\text{I}_2) = 0,00150 - x = 2,3 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

As concentracións serán:

$$[\text{IBr}]_e = \frac{0,00254 \text{ mol IBr}}{5,00 \text{ dm}^3} = 5,07 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{Br}_2]_e = [\text{I}_2]_e = \frac{2,3 \cdot 10^{-4} \text{ mol}}{5,00 \text{ dm}^3} = 4,6 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$$

b) Supoñendo comportamento ideal para os gases, a presión parcial de cada un deles vén dada por:

$$p_i = \frac{n_i \cdot R \cdot T}{V}$$

$$p(\text{IBr}) = \frac{0,00254 \text{ mol IBr} \cdot 8,31 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 423 \text{ K}}{5,00 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3} = 1,79 \cdot 10^3 \text{ Pa}$$

$$p(\text{IBr}) = 1,79 \cdot 10^3 \text{ Pa} = 1,79 \text{ kPa} \cdot \frac{1 \text{ atm}}{101,3 \text{ kPa}} = 0,0176 \text{ atm}$$

$$p(\text{Br}_2) = p(\text{I}_2) = \frac{2,3 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot 8,31 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 423 \text{ K}}{5,00 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3} = 160 \text{ Pa}$$

$$p(\text{Br}_2) = p(\text{I}_2) = 160 \text{ Pa} = 0,160 \text{ kPa} \cdot \frac{1 \text{ atm}}{101,3 \text{ kPa}} = 0,0016 \text{ atm}$$

A constante de equilibrio en función das presións será:

$$K_p = \frac{p_e^2(\text{IBr})}{p_e(\text{Br}_2) \cdot p_e(\text{I}_2)} = \frac{\left(\frac{n_e(\text{IBr}) \cdot R \cdot T}{V}\right)^2}{\left(\frac{n_e(\text{Br}_2) \cdot R \cdot T}{V}\right) \cdot \left(\frac{n_e(\text{I}_2) \cdot R \cdot T}{V}\right)} = \frac{[\text{IBr}]_e^2}{[\text{Br}_2]_e \cdot [\text{I}_2]_e} \cdot \frac{(R \cdot T)^2}{R \cdot T \cdot R \cdot T} = K_c = 120$$

4. Introdúcese fósxeno (COCl<sub>2</sub>) nun recipiente baleiro de 2 dm<sup>3</sup> de volume a unha presión de 0,82 atm e unha temperatura de 227 °C, producíndose a súa descomposición segundo o equilibrio:  
COCl<sub>2</sub>(g) ⇌ CO(g) + Cl<sub>2</sub>(g). Sabendo que nestas condicións o valor de K<sub>p</sub> é 0,189; calcula:

- a) A concentración de todas as especies presentes no equilibrio.  
 b) A presión parcial de cada unha das especies presentes no equilibrio.

Datos:  $R = 8,31 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm}\cdot\text{L}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ ;  $1 \text{ atm} = 101,3 \text{ kPa}$ .

(A.B.A.U. extr. 20)

- Rta.:** a)  $[\text{COCl}_2]_e = 0,0124 \text{ mol/dm}^3$ ;  $[\text{CO}]_e = [\text{Cl}_2]_e = 0,00756 \text{ mol/dm}^3$ ;  
 b)  $p_e(\text{COCl}_2) = 0,510 \text{ atm}$ ;  $p_e(\text{CO}) = p_e(\text{Cl}_2) = 0,310 \text{ atm}$ .

### Datos

Gas: volume

temperatura

Presión inicial de fósxeno

Constante de equilibrio (en función das presións en atm)

Constante dos gases ideais

### Incógnitas

Concentración de cada unha das especies no equilibrio

Presión parcial de cada unha das especies no equilibrio

### Ecuacións

Lei de Dalton das presións parciais

Concentración da substancia X

Ecuación de estado dos gases ideais

Constante de presións do equilibrio:  $a \text{ A} + b \text{ B} \rightleftharpoons c \text{ C} + d \text{ D}$

### Cifras significativas: 3

$$V = 2,00 \text{ dm}^3$$

$$T = 227 \text{ }^\circ\text{C} = 500 \text{ K}$$

$$p_0(\text{COCl}_2) = 0,820 \text{ atm COCl}_2$$

$$K_p = 0,189$$

$$R = 0,082 \text{ atm}\cdot\text{dm}^3\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$[\text{COCl}_2]_e, [\text{CO}]_e, [\text{Cl}_2]_e$$

$$p_e(\text{COCl}_2), p_e(\text{CO}), p_e(\text{Cl}_2)$$

$$p_t = \sum p_i$$

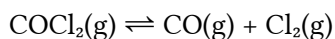
$$[\text{X}] = n(\text{X}) / V$$

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

$$K_p = \frac{p_e^c(\text{C}) \cdot p_e^d(\text{D})}{p_e^a(\text{A}) \cdot p_e^b(\text{B})}$$

### Solución:

- a) A ecuación química é:



Chámase  $x$  á presión parcial do fósxeno que se disocia

		$\text{COCl}_2$	$\rightleftharpoons$	$\text{CO}$	$\text{Cl}_2$	
Presión inicial	$p_0$	0,820		0	0	atm
Presión que reacciona ou se forma	$p_r$	$x$	$\rightarrow$	$x$	$x$	atm
Presión no equilibrio	$p_e$	$0,820 - x$		$x$	$x$	atm

A ecuación da constante de equilibrio en función das presións é:

$$K_p = \frac{p_e(\text{CO}) \cdot p_e(\text{Cl}_2)}{p_e(\text{COCl}_2)}$$

$$0,189 = \frac{x \cdot x}{0,820 - x}$$

$$x^2 + 0,189 x - 0,155 = 0$$

$$x = 0,310 \text{ atm}$$

Calcúlanse primeiro as presións parciais no equilibrio:

$$p_e(\text{CO}) = p_e(\text{Cl}_2) = x = 0,310 \text{ atm}$$

$$p_e(\text{COCl}_2) = 0,820 - x = 0,510 \text{ atm}$$

- b) Supoñendo comportamento ideal para os gases, a presión parcial de cada un deles vén dada por:

$$p_i = \frac{n_i \cdot R \cdot T}{V}$$

As concentracións serán:

$$[\text{CO}]_e = [\text{Cl}_2]_e = \frac{p(\text{Cl}_2)}{R \cdot T} = \frac{0,310 \text{ atm}}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 500 \text{ K}} = 0,00756 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{COCl}_2]_e = \frac{p(\text{COCl}_2)}{R \cdot T} = \frac{0,510 \text{ atm}}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 500 \text{ K}} = 0,0124 \text{ mol/dm}^3$$

## ◇ CUESTIÓNS

1. Para a reacción en equilibrio:  $\text{N}_2(\text{g}) + 3 \text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NH}_3(\text{g})$   $\Delta H^\circ < 0$ ; explica razoadamente como se desprazará o equilibrio se se engade  $\text{H}_2(\text{g})$ .

(A.B.A.U. ord. 20)

**Solución:**

A constante de equilibrio en función das concentracións pode escribirse así:

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3]_e^2}{[\text{N}_2]_e \cdot [\text{H}_2]_e^3} = \frac{\frac{n_e^2(\text{NH}_3)}{V^2}}{\frac{n_e(\text{N}_2)}{V} \cdot \frac{n_e^3(\text{H}_2)}{V^3}} = \frac{n_e^2(\text{NH}_3)}{n_e(\text{N}_2) \cdot n_e^3(\text{H}_2)} V^2$$

A constante de equilibrio só depende da temperatura. Non varía aínda que cambien as cantidades de reactivos ou produtos, ou diminúa o volume.

Se se engade hidróxeno, para que  $K_c$  permaneza constante, ou ben deberá aumentar o numerador  $n_e(\text{NH}_3)$ , ou diminuír a cantidade de nitróxeno no denominador  $n_e(\text{N}_2)$ . O equilibrio desprazarase (cara á dereita) ata alcanzar un novo estado de equilibrio no que haberá máis  $\text{NH}_3$  e menos  $\text{N}_2$ .

2. a) Dada a reacción:  $\text{N}_2(\text{g}) + 3 \text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NH}_3(\text{g})$ ,  $\Delta H^\circ < 0$ , razoa como inflúe sobre o equilibrio un aumento da temperatura.

(A.B.A.U. extr. 19)

**Solución:**

a) A constante de equilibrio varía coa temperatura segundo a ecuación de Van't Hoff:

$$\ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{-\Delta H^\circ}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

Para unha reacción exotérmica ( $\Delta H^\circ < 0$ ), se  $T_2 > T_1$ :

$$\frac{1}{T_2} < \frac{1}{T_1} \Rightarrow \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) < 0$$

$$\ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{-\Delta H^\circ}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) = \frac{- \cdot (-)}{+} \cdot (-) < 0$$

$$K_2 < K_1$$

A constante diminúe ao aumentar a temperatura.

## ACLARACIONES

Os datos dos enunciados dos problemas non adoitan ter un número adecuado de cifras significativas. Por iso supuxen que os datos teñen un número de cifras significativas razoables, case sempre tres cifras significativas. Menos cifras darían resultados, en certos casos, con ampla marxe de incerteza. Así que cando tomo un dato como  $V = 1 \text{ dm}^3$  e reescribo como:

Cifras significativas: 3

$$V = 1,00 \text{ dm}^3$$

o que quero indicar é que supoño que o dato orixinal ten tres cifras significativas (non que as teña en realidade) para poder realizar os cálculos cunha marxe de incerteza máis pequena que a que tería se o tomase tal como o dan. ( $1 \text{ dm}^3$  ten unha soa cifra significativa, e unha incerteza relativa do ¡100 %! Como as incertezas acumúlanse ao longo do cálculo, a incerteza final sería inadmisíble. Entón, para que realizar os cálculos? Abondaría cunha estimación).

Cuestións e problemas das [Probas de avaliación de Bacharelato para o acceso á Universidade](#) (A.B.A.U. e P.A.U.) en Galiza.

[Respostas](#) e composición de [Alfonso J. Barbadillo Marán](#).

Alguns cálculos fixéronse cunha [folla de cálculo](#) de [LibreOffice](#) do mesmo autor.

Algunhas ecuacións e as fórmulas orgánicas construíronse coa extensión [CLC09](#) de Charles Lalanne-Cassou.

A tradución ao/desde o galego realizouse coa axuda de [traducindote](#), de Óscar Hermida López.

Procurouse seguir as [recomendacións](#) do Centro Español de Metrología (CEM).

Consultouse ao Copilot de Microsoft Edge e tivéronse en conta algunhas das súas respostas nas cuestións.

## Sumario

### EQUILIBRIO QUÍMICO EN FASE GAS

<u>PROBLEMAS</u> .....	1
<u>Con datos do equilibrio</u> .....	1
<u>Coa constante como dato</u> .....	14
<u>CUESTIÓN</u> .....	20

## Índice de probas A.B.A.U.

2017.....	
1. (ord.).....	3
2. (extr.).....	6
2018.....	
1. (ord.).....	9
2. (extr.).....	13
2019.....	
1. (ord.).....	2
2. (extr.).....	8, 20
2020.....	
1. (ord.).....	11, 20
2. (extr.).....	19
2021.....	
1. (ord.).....	17
2. (extr.).....	15
2022.....	
1. (ord.).....	10
2. (extr.).....	5
2023.....	
1. (ord.).....	1
2. (extr.).....	14