

## Equilibrio químico en fase gas

### ♦ PROBLEMAS

#### ● Con datos do equilibrio

1. Introdúcese nun reactor 0,5 moles de  $\text{SbCl}_5(\text{g})$  a  $25^\circ\text{C}$ , e tras alcanzar o seguinte equilibrio:  
 $\text{SbCl}_5(\text{g}) \rightleftharpoons \text{SbCl}_3(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g})$ , obtéñense 0,15 moles de  $\text{Cl}_2(\text{g})$ , sendo a presión total de 3 atm. Calcula:  
 a) A presión parcial de cada gas no equilibrio.  
 b) O valor de  $K_p$  e  $K_c$ .

(A.B.A.U. extr. 24)

**Rta.:** a)  $p(\text{SbCl}_5)_e = 1,62 \text{ atm}$ ;  $p(\text{SbCl}_3)_e = p(\text{Cl}_2)_e = 0,692 \text{ atm}$ ; b)  $K_p = 0,297$ ;  $K_c = 0,0121$ .

#### Datos

Cantidade inicial de  $\text{PCl}_5$

Temperatura

Cantidade de  $\text{Cl}_2$  no equilibrio

Presión total no equilibrio

Constante dos gases ideais

#### Cifras significativas: 3

$n_0(\text{SbCl}_5) = 0,500 \text{ mol}$

$t = 25^\circ\text{C} = 298 \text{ K}$

$n_e(\text{Cl}_2) = 0,150 \text{ mol}$

$p = 3,00 \text{ atm}$

$R = 0,0820 \text{ atm}\cdot\text{dm}^3\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$

#### Incógnitas

Presións parciais de cada especie no equilibrio

Constantes de equilibrio

$p(\text{SbCl}_5)$ ,  $p(\text{SbCl}_3)$ ,  $p(\text{Cl}_2)$

$K_c$ ,  $K_p$

#### Outros símbolos

Cantidade da substancia A no equilibrio

$n_e(\text{A})$

#### Ecuacións

Fracción molar da substancia A

Lei de Dalton: presión parcial da substancia A

$x(\text{A}) = n(\text{A}) / n_t$

$p(\text{A}) = x(\text{A}) \cdot p_t$

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) Constrúese unha táboa, baixo a ecuación de disociación, na que se chama  $x$  á cantidade de  $\text{SbCl}_5$  que se disocia, e complétase atendendo á estequiometría da reacción. Escríbense as cantidades no equilibrio en función de  $x$ , restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais dos reactivos, e sumándoas ás dos produtos:

		$\text{SbCl}_5$	$\rightleftharpoons$	$\text{SbCl}_3$	$\text{Cl}_2$	
Cantidade inicial	$n_0$	0,500		0	0	mol
Cantidade que reacciona ou se forma	$n_r$	$x$	$\rightarrow$		$x$	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$				0,150	mol

Dedúcese que a cantidade de gas cloro que hai no equilibrio é a que se formou:  $x = 0,150 \text{ mol}$  disociados. Cálculanse as cantidades dos outros gases no equilibrio:

$$n_e(\text{SbCl}_5) = 0,500 - x = 0,500 - 0,150 = 0,350 \text{ mol SbCl}_5$$

$$n_e(\text{Cl}_2) = n_e(\text{SbCl}_3) = x = 0,150 \text{ mol}$$

Calcúlase a cantidade total de gas no equilibrio sumando:

$$n_{e\ t} = 0,350 + 0,150 + 0,150 = 0,650 \text{ mol}$$

Para calcular as presións parciais no equilibrio, calcúlanse primeiro as fraccións molares:

$$x(\text{Cl}_2) = \frac{n(\text{Cl}_2)}{n_t} = \frac{0,150 \text{ [mol Cl}_2\text{]}}{0,650 \text{ [mol total]}} = 0,231$$

$$x_e(\text{SbCl}_3) = x_e(\text{Cl}_2) = 0,231$$

$$x_e(\text{SbCl}_5) = 1 - x_e(\text{Cl}_2) - x_e(\text{SbCl}_3) = 1 - 0,231 - 0,231 = 0,538$$

Calcúlase as presións parciais no equilibrio, aplicando a lei de Dalton:

$$p(\text{SbCl}_5)_e = 0,538 \cdot 3,00 \text{ [atm]} = 1,62 \text{ atm}$$

$$p(\text{SbCl}_3)_e = p(\text{Cl}_2)_e = 0,231 \cdot 3,00 \text{ [atm]} = 0,692 \text{ atm}$$

b) Calcúlase a constante de equilibrio en función das presións:

$$K_p = \frac{p_e(\text{SbCl}_3) \cdot p_e(\text{Cl}_2)}{p_e(\text{SbCl}_5)} = \frac{0,692 \cdot 0,692}{1,62} = 0,297 \text{ (presións en atm)}$$

Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

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

Calcúlase a constante de equilibrio en función das concentracións:

$$K_c = \frac{K_p}{R \cdot T} = \frac{0,297}{0,082 \cdot 298} = 0,012 \text{ l(concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

2. Nun matraz de 5 dm<sup>3</sup> introdúcense 0,80 moles de N<sub>2</sub> e 0,40 moles de O<sub>2</sub> e quéntase a 2200 K, establecéndose o seguinte equilibrio: N<sub>2</sub>(g) + O<sub>2</sub>(g) ⇌ 2 NO(g). Tendo en conta que nesas condicións reacciona o 1,1 % do N<sub>2</sub> inicial:

a) Calcula o valor da constante  $K_c$ .

b) Calcula a constante  $K_p$  e discute razoadamente que sucederá no equilibrio se se aumenta a presión do sistema.

(A.B.A.U. ord. 24)

**Rta.:** a)  $K_c = 1,0 \cdot 10^{-3}$ ; b)  $K_p = 1,0 \cdot 10^{-3}$ . Nada.

### Datos

Gas: volume

temperatura

Cantidade inicial: nitróxeno

osíxeno

Porcentaxe de nitróxeno que reacciona

Constante dos gases ideais

### Incógnitas

Constante de equilibrio das concentracións

Constante de equilibrio das presións

### Outros símbolos

Concentración dunha especie X

Cantidade da substancia X no equilibrio

### Cifras significativas: 3

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

$$T = 2200 \text{ K}$$

$$n_0(\text{N}_2) = 0,800 \text{ mol}$$

$$n_0(\text{O}_2) = 0,400 \text{ mol}$$

$$\% \text{ reacciona: } 1,10 \% \text{ N}_2$$

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

$$K_c$$

$$K_p$$

$$[X]$$

$$n_e(X)$$

**Ecuacións**

Concentración da substancia X

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

Ecuación de estado dos gases ideais

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

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) Calcúlase a cantidade de  $N_2$  que reacciona:

$$n = \frac{1,10}{100} \cdot 0,800 = 0,0088 \text{ mol } N_2$$

Constrúese unha táboa baixo a ecuación, na que se escriben as cantidades iniciais e as cantidades que reaccionan e fórmanse, atendendo á estequiometría da reacción. Cálculanse as cantidades no equilibrio, restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais no caso dos reactivos, e sumándoas no caso dos produtos.

		$N_2$	$O_2$	$\rightleftharpoons$	$2 NO$	
Cantidade inicial	$n_0$	0,800	0,400		0	mol
Cantidade que reacciona	$n_r$	0,0088	0,0088	$\rightarrow$	0,0176	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$0,800 - 0,0088 = 0,791$	$0,400 - 0,0088 = 0,391$		0,0176	mol

a) Calcúlase a constante de equilibrio en función das concentracións, :

$$K_c = \frac{[NO]_e^2}{[N_2]_e \cdot [O_2]_e} = \frac{\left(\frac{0,0176}{5,00}\right)^2}{\left(\frac{0,791}{5,00}\right) \cdot \left(\frac{0,391}{5,00}\right)} = 1,00 \cdot 10^{-3} \text{ (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

b) Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

$$K_p = \frac{p_e^2(NO)}{p_e(N_2) \cdot p_e(O_2)} = \frac{[NO]_e^2 \cdot (R \cdot T)^2}{[N_2]_e \cdot R \cdot T \cdot [O_2]_e \cdot R \cdot T} = \frac{[NO]_e^2}{[N_2]_e [O_2]_e} = K_c$$

Polo tanto:

$$K_p = K_c = 1,0 \cdot 10^{-3}$$

Segundo o principio de Le Chatelier, se un sistema en equilibrio é sometido a un cambio, o sistema tende a axustarse para minimizar o efecto desta perturbación. Se se aumenta a presión, o sistema non varía, posto que a presión é a mesma en calquera fase da reacción. A presión en calquera estado de equilibrio é a mesma que a presión inicial, porque a cantidade total de gas non varía.

3. Nun reactor de 5 dm<sup>3</sup> introdúcense 15,3 g de  $CS_2$  e 0,82 g de  $H_2$ . Ao elevar a temperatura ata 300 °C alcánzase o seguinte equilibrio:  $CS_2(g) + 4 H_2(g) \rightleftharpoons 2 H_2S(g) + CH_4(g)$ , onde a concentración de metano no equilibrio é de 0,01 mol/dm<sup>3</sup>.

- Calcula as concentracións molares das especies  $CS_2(g)$ ,  $H_2(g)$  e  $H_2S(g)$  no equilibrio.
- Determina o valor de  $K_c$  e discute razoadamente que lle sucederá ó sistema en equilibrio se engadimos máis cantidade de  $CS_2(g)$  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)  $[CS_2] = 0,0302$ ;  $[H_2] = 0,0413$ ;  $[H_2S] = 0,0200 \text{ mol/dm}^3$ ; b)  $K_c = 45,3$ ; 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

**Incógnitas**

Concentración molar de cada especie no equilibrio

Constante de equilibrio das concentracións

**Outros símbolos**

Concentración dunha especie X

Cantidade da substancia X no equilibrio

**Ecuacións**

Concentración da substancia X

Ecuación de estado dos gases ideais

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

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

$$T = 300 \text{ }^\circ\text{C} = 573 \text{ K}$$

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

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

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

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

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

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

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

$$K_c$$

$$[\text{X}]$$

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

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

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

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

**Solución:**a) Cálculanse as cantidades iniciais de  $\text{CS}_2$  e  $\text{H}_2$ :

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

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

Cálculase a cantidade de  $\text{CH}_4$  que se formou, a partir da súa concentración no equilibrio:

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

Constrúese unha táboa baixo a ecuación, na que se escriben as cantidades iniciais e as cantidades que reaccionan e fórmanse, atendendo á estequiometría da reacción. Cálculanse as cantidades no equilibrio, restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais no caso dos reactivos, e sumándoas no caso dos produtos.

		$\text{CS}_2$	$4 \text{ H}_2$	$\rightleftharpoons$	$2 \text{ H}_2\text{S}$	$\text{CH}_4$	
Cantidade inicial	$n_0$	0,201	0,407		0	0	mol
Cantidade que reacciona	$n_r$	0,0500	0,200	$\rightarrow$	0,100	0,0500	mol
Cantidade no equilibrio	$n_e$	$0,201 - 0,0500 = 0,151$	$0,407 - 0,200 = 0,207$		0,100	0,0500	mol

Cálculanse as concentracións no equilibrio:

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

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

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

b) Calcúlase a constante de equilibrio en función das concentracións:

$$K_c = \frac{[\text{H}_2\text{S}]_e^2 \cdot [\text{CH}_4]_e}{[\text{CS}_2]_e \cdot [\text{H}_2]_e^4} = \frac{(0,020)^2 \cdot 0,010}{0,030 \cdot 2(0,041)^4} = 45,3 = 0,016 \cdot 8 (\text{concentracións en mol/dm}^3)$$

Segundo o principio de Le Chatelier, se engadimos máis  $\text{CS}_2$  ao sistema en equilibrio mantendo o volume e a temperatura constantes, o sistema reaxustarase para minimizar o efecto desta perturbación. Neste caso, consumirase máis  $\text{CS}_2$  e  $\text{H}_2$  para formar máis  $\text{H}_2\text{S}$  e  $\text{CH}_4$  ata que se alcance un novo estado de equilibrio. Polo tanto, as concentracións de  $\text{CS}_2$  e  $\text{H}_2$  diminuirán mentres que as concentracións de  $\text{H}_2\text{S}$  e  $\text{CH}_4$  aumentarán.

4. 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  $\text{HCl}$  e 1,2 moles de  $\text{O}_2$  nun recipiente pechado de  $10 \text{ dm}^3$  no que previamente se fixo o baleiro. Quéntase a mestura a  $390^\circ \text{C}$  e, cando se alcanza o equilibrio a esta temperatura, obsérvase a formación de 0,40 moles de  $\text{Cl}_2$ . Calcula:

a) O valor da constante  $K_c$ .

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

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

(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

Cantidade inicial de  $\text{HCl}$

Cantidade inicial de  $\text{O}_2$

Cantidade no equilibrio de  $\text{Cl}_2$

Constante dos gases ideais

### Cifras significativas: 3

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

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

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

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

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

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

### Incógnitas

Constante do equilibrio  $K_c$

Presións parciais de cada compoñente

Constante do equilibrio  $K_p$

$K_c$

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

$K_p$

### Ecuacións

Ecuación de estado dos gases ideais

Concentración da substancia X

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

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

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) Constrúese unha táboa baixo a ecuación, na que se escriben as cantidades iniciais e as cantidades que reaccionan e fórmanse, atendendo á estequiometría da reacción. Calcúlanse as cantidades no equilibrio, restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais dos reactivos, e sumándolas ás dos produtos.

		4 HCl	O <sub>2</sub>	$\rightleftharpoons$	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	$\rightarrow$	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

Calcúlanse as concentracións no equilibrio, dividindo as cantidades entre o volume de recipiente:

$$[\text{HCl}] = \frac{n_e(\text{HCl})}{V} = \frac{0,100 \text{ mol HCl}}{10,0 \text{ dm}^3} = 0,0100 \text{ mol/dm}^3$$

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

$$[\text{Cl}_2] = [\text{H}_2\text{O}] = \frac{n_e(\text{Cl}_2)}{V} = \frac{0,400 \text{ mol}}{10,0 \text{ dm}^3} = 0,0400 \text{ mol/dm}^3$$

Cálculase a constante de equilibrio en función das concentracións:

$$K_c = \frac{[\text{Cl}_2]_e^2 [\text{H}_2\text{O}]_e^2}{[\text{HCl}]_e^4 [\text{O}_2]_e} = \frac{0,0400^2 \cdot 0,0400^2}{0,0100^4 \cdot 0,00100} = 2,56 \cdot 10^3 \text{ (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

b) A presión parcial dun gas nunha mestura é a que exercería o gas se se atopase só no recipiente. Cálculanse as presións parciais supoñendo comportamento ideal.

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

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

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

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

Cálculase a constante de equilibrio en función das presións:

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

5. Nun recipiente de 2,0 L introdúcese 2,1 moles de  $\text{CO}_2$  e 1,6 moles de  $\text{H}_2$  e quéntase a 1800 °C. Unha vez alcanzado o seguinte equilibrio:  $\text{CO}_2(\text{g}) + \text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{CO}(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g})$  analízase a mestura e atópanse 0,90 moles de  $\text{CO}_2$ . 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

temperatura

Cantidade inicial de  $\text{CO}_2$

Cantidade inicial de  $\text{H}_2$

Cantidade de  $\text{CO}_2$  no equilibrio

### Incógnitas

Cantidade (moles) de cada compoñente no equilibrio

Constantes de equilibrio

### Ecuacións

Concentración da substancia X

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

### Cifras significativas: 3

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

$$T = 1800 \text{ °C} = 2073 \text{ K}$$

$$n_0(\text{CO}_2) = 2,10 \text{ mol CO}_2$$

$$n_0(\text{H}_2) = 1,60 \text{ mol H}_2$$

$$n_e(\text{CO}_2) = 0,900 \text{ mol CO}_2$$

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

$$K_c, K_p$$

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

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

**Solución:**

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

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

Constrúese unha táboa baixo a ecuación, na que se escriben as cantidades iniciais e as cantidades que reaccionan e fórmanse, atendendo á estequiometría da reacción. Cálculanse as cantidades no equilibrio, restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais dos reactivos, e sumándoas ás dos produtos.

		CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	⇌	H <sub>2</sub> O	CO	
Cantidad inicial	$n_o$	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

Cálculanse as concentracións no equilibrio:

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

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

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

b) Cálculase a constante de equilibrio en función das concentracións:

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

Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

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

Polo tanto:

$$K_p = K_c = 4,0$$

6. 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

**Cifras significativas: 3**

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

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

**Datos**

temperatura  
 presión  
 Cantidade de auga no equilibrio  
 Constante dos gases ideais  
 Masa molar do dióxido de carbono

**Cifras significativas: 3**

$T = 337\text{ °C} = 610\text{ K}$   
 $p_{t0} = 10,0\text{ atm} = 1,013 \cdot 10^6\text{ Pa}$   
 $n_e(\text{H}_2\text{O}) = 0,0100\text{ mol H}_2\text{O}$   
 $R = 0,082\text{ atm}\cdot\text{dm}^3\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} = 8,31\text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$   
 $M(\text{CO}_2) = 44,0\text{ g/mol}$

**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  
 Concentración da substancia X

$n = m / M$   
 $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$   
 $[X] = n(X) / V$

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:**

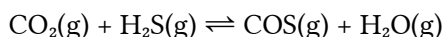
a) Calcúlase a cantidade inicial de  $\text{CO}_2$ :

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

Calcúlase a cantidade total de gas, supoñendo comportamento ideal, no equilibrio:

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

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

$$n_{te} = (n_1 - x) + (n_2 - x) + x + x = n_1 + n_2$$

Vese que é igual que a que había inicialmente.

Polo tanto, a cantidade de  $\text{H}_2\text{S}(\text{g})$  que había inicialmente era:

$$n_0(\text{H}_2\text{S}) = 0,399\text{ [mol total]} - 0,100\text{ [mol CO}_2\text{]} = 0,299\text{ mol H}_2\text{S}$$

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

		$\text{CO}_2$	$\text{H}_2\text{S}$	$\rightleftharpoons$	$\text{COS}$	$\text{H}_2\text{O}$	
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



		CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> S	⇌	COS	H <sub>2</sub> O	
Cantidad no equilibrio	$n_e$					0,0100	mol

Como no equilibrio hai 0,0100 mol de H<sub>2</sub>O(g), esta é a cantidade de auga que se formou:

$$x = 0,0100 \text{ mol}$$

Calcúlanse as cantidades de todos os gases no equilibrio:

$$n_e(\text{CO}_2) = 0,100 [\text{mol iniciais}] - 0,0100 [\text{mol que reaccionan}] = 0,090 \text{ mol CO}_2 \text{ no equilibrio}$$

$$n_e(\text{H}_2\text{S}) = 0,299 [\text{mol iniciais}] - 0,0100 [\text{mol que reaccionan}] = 0,289 \text{ mol H}_2\text{S no equilibrio}$$

$$n_e(\text{COS}) = 0,0100 [\text{mol formados}] = 0,0100 \text{ mol COS no equilibrio}$$

Calcúlase a concentración de cada especie no equilibrio:

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

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

$$[\text{COS}]_e = [\text{H}_2\text{O}]_e = \frac{0,0100 \text{ mol}}{2,00 \text{ dm}^3} = 0,00500 \text{ mol/dm}^3$$

b) Calcúlase a constante de equilibrio en función das concentracións:

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

Como un dos factores (0,045 mol CO<sub>2</sub>) ten só dúas cifras significativas, a constante só pode ter dúas cifras significativas.

Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

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

Polo tanto:

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

7. Introdúcense 0,2 moles de Br<sub>2</sub> nun recipiente de 0,5 L de capacidade a 600 °C. Unha vez establecido o equilibrio Br<sub>2</sub>(g) ⇌ 2 Br(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

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

Grao de disociación

Constante dos gases ideais

#### Cifras significativas: 3

$$V = 0,500 \text{ dm}^3$$

$$T = 600 \text{ °C} = 873 \text{ K}$$

$$n_0(\text{Br}_2) = 0,200 \text{ mol Br}_2$$

$$\alpha = 0,800$$

$$R = 0,0820 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

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

Presións parciais exercida por cada compoñente

 $p(\text{Br}_2), p(\text{Br})$ **Outros símbolos**Cantidade de  $\text{Br}_2$  que se ha dissociado $n_d(\text{Br}_2)$ **Ecuacións**

Concentración da substancia X

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

Grao de disociación

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

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:**

Cálculase a cantidade de bromo que se ha dissociado:

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

Constrúese unha táboa baixo a ecuación, na que se escriben as cantidades iniciais e as cantidades que reaccionan e fórmanse, atendendo á estequiometría da reacción. Cálculanse as cantidades no equilibrio, restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais no caso dos reactivos, e sumándoas no caso dos produtos. Cálculanse as concentracións no equilibrio, dividindo as cantidades entre o volume do recipiente.

		$\text{Br}_2$	$\rightleftharpoons$	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>

Cálculase a constante de equilibrio en función das concentracións:

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

Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

$$K_p = \frac{p_e^2(\text{Br})}{p_e(\text{Br}_2)} = \frac{([\text{Br}]_e \cdot R \cdot T)^2}{[\text{Br}_2]_e \cdot R \cdot T} = \frac{[\text{Br}]_e^2}{[\text{Br}_2]_e} = K_c \cdot R \cdot T = 5,12 \cdot 0,082 \cdot 298,15 = 124,7 \text{ (presións en atm)}$$

b) A presión parcial dun gas nunha mestura é a que exercería o gas se se atopase só no recipiente. Cálculanse as presións parciais supoñendo comportamento ideal.

$$p(\text{Br}) = \frac{n(\text{Br}) \cdot R \cdot T}{V_T} = \frac{0,640 \text{ mol} \cdot 8,31 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 298,15 \text{ K}}{0,500 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3} = 4,65 \cdot 10^6 \text{ Pa} = 4650 \text{ kPa} \cdot \frac{1 \text{ atm}}{101,3 \text{ kPa}} = 45,9 \text{ atm}$$

$$p(\text{Br}_2) = \frac{n(\text{Br}_2) \cdot R \cdot T}{V_T} = \frac{0,080 \text{ mol} \cdot 8,31 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 298,15 \text{ K}}{0,500 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3} = 5,8 \cdot 10^5 \text{ Pa} = 580 \text{ kPa} \cdot \frac{1 \text{ atm}}{101,3 \text{ kPa}} = 5,7 \text{ atm}$$

8. b) Nun matraz de 1,5 dm<sup>3</sup>, no que se fixo o baleiro, introdúcense 0,08 moles de  $\text{N}_2\text{O}_4$  e quéntase a 35 °C. Parte do  $\text{N}_2\text{O}_4$  disóciase segundo a reacción:  $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NO}_2(\text{g})$  e cando se alcanza o equilibrio a presión total é de 2,27 atm. Calcula a porcentaxe de  $\text{N}_2\text{O}_4$  dissociado.

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. extr. 19)

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

b)

### Datos

Volume

Temperatura

Cantidad inicial de tetraóxido de dinitrógeno

Presión no equilibrio

Constante dos gases ideais

### Cifras significativas: 3

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

$$T = 35 \text{ }^\circ\text{C} = 308 \text{ K}$$

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

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

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

### Incógnitas

Porcentaxe de  $\text{N}_2\text{O}_4$  disociado

$\alpha$

### Ecuacións

Concentración da substancia X

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

Ecuación de estado dos gases ideais

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

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

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

### Solución:

b) Constrúese unha táboa, baixo a ecuación de disociación, na que se chama  $x$  á cantidade de  $\text{N}_2\text{O}_4$  que se disocia, e complétase atendendo á estequiometría da reacción. Escríbense as cantidades no equilibrio en función de  $x$ , restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais dos reactivos, e sumándoas ás dos produtos:

		$\text{N}_2\text{O}_4$	$\rightleftharpoons$	$2 \text{ NO}_2$	
Cantidad inicial	$n_0$	0,0800		0	mol
Cantidad que reacciona ou se forma	$n_r$	$x$	$\rightarrow$	$2 x$	mol
Cantidad no equilibrio	$n_e$	$0,0800 - x$		$2 x$	mol

Escríbese a cantidade total de gas no equilibrio en función de  $x$ :

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

Por outra banda, pódese calcular a cantidade de gas a partir da presión total, supoñendo comportamento ideal:

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

Comparando coa ecuación anterior, calcúlase a cantidade de  $\text{N}_2\text{O}_4$  que se disociou:

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

Calcúlase a porcentaxe de  $\text{N}_2\text{O}_4$  disociado:

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

9. Nun reactor de 10 L introdúcense 2,5 moles de  $\text{PCl}_5$  e quéntase ata  $270 \text{ }^\circ\text{C}$ , producíndose a reacción:  $\text{PCl}_5(\text{g}) \rightleftharpoons \text{PCl}_3(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g})$ . Unha vez alcanzado o equilibrio compróbase que a presión no reactor é de 15,7 atm. Calcula:

- O número de moles de todas as especies presentes no equilibrio.
- 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

**Cifras significativas: 3**

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

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

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

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

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

**Incógnitas**

Concentracións de cada especie no equilibrio

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

Constantes de equilibrio

$$K_c, K_p$$

**Outros símbolos**

Cantidade da substancia X no equilibrio

$$n_e(X)$$

**Ecuacións**

Concentración da substancia X

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

Ecuación de estado dos gases ideais

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

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) Cálculase a cantidade de gas que hai no equilibrio, supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

Constrúese unha táboa, baixo a ecuación de disociación, na que se chama  $n_0$  á cantidade inicial de  $\text{PCl}_5$ ,  $x$  á cantidade de  $\text{PCl}_5$  que se disocia, e complétase atendendo á estequiometría da reacción. Cálculanse as cantidades no equilibrio, restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais no caso dos reactivos, e sumándolas no caso dos produtos:

		$\text{PCl}_5$	$\rightleftharpoons$	$\text{PCl}_3$	$\text{Cl}_2$	
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, calcúlase a cantidade de  $\text{PCl}_5$  que se disociou:

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

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

Cálculanse as cantidades de cada gas no equilibrio:

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

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

Cálculanse as concentracións dividindo as cantidades entre o volume do recipiente:

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

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

b) Calcúlase a constante de equilibrio en función das concentracións:

$$K_c = \frac{[\text{PCl}_3]_e \cdot [\text{Cl}_2]_e}{[\text{PCl}_5]_e} = \frac{0,102 \cdot 0,102}{0,148} = 0,0708 \text{ (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

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

Calcúlase a constante de equilibrio en función das presións:

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

10. 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  $K_c$  e  $K_p$  á devandita temperatura.

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. 22)

**Rta.:** a)  $p(\text{SO}_2\text{Cl}_2) = 2,81 \text{ atm}$ ;  $p(\text{SO}_2) = p(\text{Cl}_2) = 1,61 \text{ atm}$ ; b)  $K_c = 0,0168$ ;  $K_p = 0,927$ .

### Datos

Gas: volume

temperatura

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

Grao de disociación

Constante dos gases ideais

### Cifras significativas: 3

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

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

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

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

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

### Incógnitas

Presións parciais de cada especie no equilibrio

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

Constantes de equilibrio

$$K_c, K_p$$

### Outros símbolos

Concentración dunha especie X

$$[X]$$

Cantidade da substancia X no equilibrio

$$n_e(X)$$

### Ecuacións

Lei de Dalton das presións parciais

$$p_t = \sum p_i$$

Concentración da substancia X

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

Ecuación de estado dos gases ideais

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

Grao de disociación

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

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) Calcúlase a cantidade de SO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> disociada:

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

Constrúese unha táboa baixo a ecuación, na que se escriben as cantidades iniciais e as cantidades que reaccionan e fórmanse, atendendo á estequiometría da reacción. Cálculanse as cantidades no equilibrio, restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais no caso dos reactivos, e sumándolas no caso dos produtos.

		SO <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	⇌	SO <sub>2</sub>	Cl <sub>2</sub>	
Cantidad inicial	$n_0$	0,400		0	0	mol
Cantidad que reacciona ou se forma	$n_r$	0,146	→	0,146	0,146	mol
Cantidad no equilibrio	$n_e$	0,400 - 0,146 = 0,254		0,146	0,146	mol

Cálculanse as concentracións no equilibrio, dividindo as cantidades entre o volume do recipiente.

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

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

A presión parcial dun gas nunha mestura é a que exercería o gas se se atopase só no recipiente. Cálculanse as presións parciais supoñendo comportamento ideal.

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

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

a) Cálculase a constante de equilibrio en función das concentracións:

$$K_c = \frac{[\text{SO}_2]_e \cdot [\text{Cl}_2]_e}{[\text{SO}_2\text{Cl}_2]_e} = \frac{0,0292 \cdot 0,0292}{0,0580} = 0,0168 \text{ (concentracións en mol/dm}^3\text{)}$$

Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

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

Cálculase a constante de equilibrio en función das presións:

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

11. Nun recipiente pechado introdúcese 2,0 moles de CH<sub>4</sub> e 1,0 mol de H<sub>2</sub>S á temperatura de 727 °C, establecéndose o seguinte equilibrio: CH<sub>4</sub>(g) + 2 H<sub>2</sub>S(g) ⇌ CS<sub>2</sub>(g) + 4 H<sub>2</sub>(g). Una vez alcanzado o equilibrio, a presión parcial do H<sub>2</sub> 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

Cantidad inicial de metano

Cantidad inicial de sulfuro de hidróxeno

Presión parcial do hidróxeno no equilibrio

Presión total no equilibrio

Constante dos gases ideais

### Cifras significativas: 3

$T = 727 \text{ °C} = 1000 \text{ K}$

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

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

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

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

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

**Incógnitas**

Cantidade no equilibrio de cada substancia	$n_e(\text{CH}_4), n_e(\text{H}_2\text{S}), n_e(\text{CS}_2), n_e(\text{H}_2)$
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	$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$
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) Constrúese unha táboa baixo a ecuación de reacción, na que se chama  $x$  á cantidade de  $\text{CH}_4$  que reacciona, e complétase atendendo á estequiometría da reacción. Escríbense as cantidades no equilibrio en función de  $x$ , restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais no caso dos reactivos, e sumándoas no caso dos produtos:

		$\text{CH}_4$	$2 \text{H}_2\text{S}$	$\rightleftharpoons$	$\text{CS}_2$	$4 \text{H}_2$	
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

Escríbese a cantidade total de gas no equilibrio en función de  $x$ :

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

A presión parcial dun gas nunha mestura é a que exercería o gas se se atopase só no recipiente. Escríbese unha ecuación da cantidade no equilibrio de gas  $\text{H}_2$  en función do volume, a partir da presión parcial do hidróxeno, supoñendo comportamento ideal:

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

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

Analogamente coa presión total:

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

$$3,00 + 2x = 0,0104 \cdot V$$

Resólvese o sistema de dúas ecuacións con dúas incógnitas:

$$\left. \begin{array}{l} 4x = 0,00244 \cdot V \\ 3,00 + 2x = 0,0104 \cdot V \end{array} \right\}$$

Divídese a segunda ecuación entre a primeira e calcúlase o volume  $V$  do recipiente e a cantidade  $x$  de  $\text{CH}_4$  que reaccionou ata acadar o equilibrio.

$$\frac{3,00 + 2x}{4x} = \frac{0,0104 \cdot V}{0,00244 \cdot V} = 4,25 \Rightarrow 3,00 + 2x = 17,0x \Rightarrow x = 0,200$$

$$V = \frac{4x}{0,00244} = \frac{4 \cdot 0,200}{0,00244} = 328$$

As cantidades das substancias no equilibrio son:

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

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

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

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

Calcúlase a constante de equilibrio en función das concentracións:

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

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

Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

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

Calcúlase a constante de equilibrio en función das presións:

$$K_p = 1,2 \cdot 10^{-6} \cdot (0,082 \cdot 1000)^2 = 0,0079 \text{ (presións en atm)}$$

12. Ao quentar  $\text{HgO(s)}$  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  $380^\circ\text{C}$ , a presión total no recipiente é de 0,185 atm. Calcula:
- As presións parciais das especies presentes no equilibrio.
  - O valor das constantes  $K_c$  e  $K_p$  da reacción.
- Datos:  $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $1 \text{ atm} = 101,3 \text{ kPa}$ . (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

### Incógnitas

Presións parciais das especies no equilibrio

Constantes de equilibrio

### Outros símbolos

Cantidade da substancia X no equilibrio

### Ecuacións

Concentración da substancia X

Ecuación dos gases ideais

Lei de Dalton das presións parciais

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

### Cifras significativas: 3

$$t = 380^\circ\text{C} = 653 \text{ K}$$

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

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

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

$$K_c, K_p$$

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

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

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

$$p_t = \sum p_i$$

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

**Solución:**



a) Constrúese unha táboa baixo a ecuación de reacción, na que se chama  $n_0$  á cantidade inicial de HgO, e  $x$  á cantidade de HgO que reacciona, e complétase atendendo á estequiometría da reacción. Escríbense as cantidades no equilibrio en función de  $x$ , restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais no caso dos reactivos, e sumándoas no caso dos produtos:

		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>.

$$p = p(\text{Hg}) + p(\text{O}_2)$$

A presión parcial do Hg é o dobre que a presión parcial de O<sub>2</sub>. Chamando  $y$  á presión parcial do osíxeno, queda:

$$0,185 = 2 \cdot y + y = 3y$$

$$y = 0,0617 \text{ atm}$$

Polo tanto, as presións son:

$$p(\text{O}_2) = 0,0617 \text{ atm}$$

$$p(\text{Hg}) = 0,123 \text{ atm}$$

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

b) Calcúlase a constante de equilibrio en función das presións:

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

Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases, e calcúlase a constante de equilibrio en función das concentracións:

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

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

### ● 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

 $[H_2]_e, [CO_2]_e, [H_2O]_e, [CO]_e$ 

Constante de equilibrio en función das presións

 $K_p$ **Ecuacións**

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) As concentracións iniciais son:

$$[H_2O]_0 = [CO]_0 = 2,0 \text{ mol} / 2 \text{ dm}^3 = 1 \text{ mol/dm}^3$$

Constrúese unha táboa, baixo a ecuación da reacción, na que se chama  $x$  á concentración de CO que reacciona, e complétase atendendo á estequiometría da reacción. Escríbense as concentracións no equilibrio en función de  $x$ , restando as concentracións que reaccionaron das concentracións iniciais dos reactivos, e sumándolas ás dos produtos:

		CO	H <sub>2</sub> O	$\rightleftharpoons$	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	
Concentración inicial	$[X]_0$	1,0	1,0		0	0	mol/dm <sup>3</sup>
Concentración que reacciona ou se forma	$[X]_r$	$x$	$x$	$\rightarrow$	$x$	$x$	mol/dm <sup>3</sup>
Concentración no equilibrio	$[X]_{eb}$	$1,0 - x$	$1,0 - x$		$x$	$x$	mol/dm <sup>3</sup>

Escríbese a expresión da constante de equilibrio en función das concentracións.

Para calcular as concentracións no equilibrio, substitúense as concentracións polas expresións en función de  $x$ .

$$K_c = \frac{[CO_2]_e \cdot [H_2]_e}{[H_2O]_e \cdot [CO]_e} \Rightarrow 5,0 = \frac{x \cdot x}{(1,0 - x) \cdot (1,0 - x)}$$

Ao resolver a ecuación de segundo grao, extraendo a raíz cadrada en ambos os lados, obtéñense dúas solucións.

$$\frac{x}{(1,0 - x)} = \pm \sqrt{5,0} = \pm 2,2 \Rightarrow x = \pm 2,2(1,0 - x) \Rightarrow \begin{cases} x_1 + 2,2x = 2,2 \Rightarrow x_1 = 2,2/3,2 = 0,69 \\ x_2 - 2,2x = -2,2 \Rightarrow x_2 = -2,2/-1,2 = 1,8 \end{cases}$$

Tómase a primeira solución ( $x = 0,69$ ), porque a outra daría concentracións negativas no equilibrio.

As concentracións no equilibrio son:

$$[CO_2]_e = [H_2]_e = 0,69 \text{ mol/dm}^3$$

$$[CO]_e = [H_2O]_e = 1,0 - 0,69 = 0,3 \text{ mol/dm}^3$$

b) Dedúcese a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases e calcúlase a constante de equilibrio en función das presións:

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

$$K_p = \frac{p_e(CO_2) \cdot p_e(H_2)}{p_e(H_2O) \cdot p_e(CO)} = \frac{\left(\frac{n_e(CO_2) \cdot R \cdot T}{V}\right) \cdot \left(\frac{n_e(H_2) \cdot R \cdot T}{V}\right)}{\left(\frac{n_e(H_2O) \cdot R \cdot T}{V}\right) \cdot \left(\frac{n_e(CO) \cdot R \cdot T}{V}\right)} = \frac{[CO_2]_e \cdot [H_2]_e}{[H_2O]_e \cdot [CO]_e} \cdot \frac{R \cdot T \cdot R \cdot T}{R \cdot T \cdot R \cdot T} = K_c = 5,0$$

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  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2$  e menos  $\text{H}_2\text{O}$ .

2. Nun recipiente de 10 litros introdúcese 2 moles de  $\text{N}_2\text{O}_4$  gasoso a  $50^\circ\text{C}$  producíndose o seguinte equilibrio de disociación:  $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NO}_2(\text{g})$ . 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  $\text{N}_2\text{O}_4$ .

b) As presións parciais de cada gas e a presión total no equilibrio.

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

(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)

Constante dos gases ideais

### Cifras significativas: 3

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

$$T = 50^\circ\text{C} = 323 \text{ K}$$

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

$$K_c = 1,06$$

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

### Incógnitas

Concentracións dos dous gases no equilibrio

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

Presión parcial de cada gas e presión total no equilibrio

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

### Ecuacións

Lei de Dalton das presións parciais

$$p_t = \sum p_i$$

Concentración da substancia X

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

Grao de disociación

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

Ecuación de estado dos gases ideais

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

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

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

### Solución:

- b) Cálculase a presión inicial do tetraóxido de dinitróxeno, supoñendo comportamento ideal:

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

Constrúese unha táboa, baixo a ecuación da reacción, na que se chama  $x$  á presión parcial de tetraóxido de dinitróxeno que se transforma en dióxido de nitróxeno, e complétase atendendo á estequiometría da reacción. Escríbense as presións no equilibrio en función de  $x$ , restando as presións que reaccionaron das presións iniciais dos reactivos, e sumándoas ás dos produtos:

		$\text{N}_2\text{O}_4$	$\rightleftharpoons$	$2 \text{NO}_2$	
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

Substitúense as presións no equilibrio na ecuación da constante de equilibrio en función das presións:

$$K_p = \frac{p_e^2(\text{NO}_2)}{p_e(\text{N}_2\text{O}_4)} \Rightarrow 1,06 = \frac{(2x)^2}{5,30 - x}$$

Resólvese a ecuación de segundo grao:

$$5,62 - 1,06 x = 4 x^2$$

$$x = \frac{-1,06 \pm \sqrt{1,06^2 - 4 \cdot 4 \cdot (-5,62)}}{2 \cdot 4} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 1,06 \\ x_2 = -1,33 \end{cases}$$

Tómase a solución positiva ( $x = 1,06$ ), porque a outra daría presións negativas no equilibrio. Calcúlanse as presións parciais no equilibrio:

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

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

Calcúlase a presión total coa 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) As concentracións calcúlanse coa ecuación dos gases ideais:

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

$$[\text{NO}_2]_e = \frac{2,12 \text{ atm}}{0,082 \cdot \text{atm} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 323 \text{ K}} = 0,0800 \text{ mol/dm}^3$$

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

Calcúlase o grao de disociación:

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

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 introdúcense 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

Cantidad inicial de iodo

Cantidad 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

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

**Incógnitas**

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

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

Ecuación de estado dos gases ideais

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

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) Constrúese unha táboa, baixo a ecuación da reacción, na que se chama  $x$  á cantidade de iodo que se transforma en bromuro de iodo, e complétase atendendo á estequiometría da reacción. Escríbense as cantidades no equilibrio en función de  $x$ , restando as cantidades que reaccionaron das cantidades iniciais dos reactivos, e sumándoas ás dos produtos:

		I <sub>2</sub>	Br <sub>2</sub>	$\rightleftharpoons$	2 IBr	
Cantidade inicial	$n_0$	0,00150	0,00150		0	mol
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

Substitúense as concentracións, que se obtéñen dividindo as cantidades entre o volume, na ecuación da constante de equilibrio en función das concentracións:

$$K_c = \frac{[IBr]_e^2}{[I_2]_e \cdot [Br_2]_e} \Rightarrow 120 = \frac{\left(\frac{n_e(IBr)}{V}\right)^2}{\left(\frac{n_e(I_2)}{V}\right) \cdot \left(\frac{n_e(Br_2)}{V}\right)} = \frac{\left(\frac{2x}{5,00}\right)^2}{\left(\frac{0,00150-x}{5,00}\right) \left(\frac{0,00150-x}{5,00}\right)} = \frac{(2x)^2}{(0,00150-x)^2}$$

Resólvese a ecuación que se obtén ao facer a raíz cadrada aos dous lados da ecuación:

$$\pm \sqrt{120} = \pm 11,0 = \frac{2x}{0,00150-x} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 0,00127 \\ x_2 = 0,00184 \end{cases}$$

Tómase a primeira solución ( $x = 0,00127$ ), porque a outra daría cantidades negativas no equilibrio. Calcúlanse as cantidades no equilibrio:

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

$$n_e(Br_2) = n_e(I_2) = 0,00150 - x = 2,3 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

Obtéñense as concentracións, dividindo as cantidades entre o volume do recipiente:

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

$$[Br_2]_e = [I_2]_e = \frac{2,3 \cdot 10^{-4} \text{ mol}}{5,00 \text{ dm}^3} = 4,6 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$$

b) A presión parcial dun gas nunha mestura é a que exercería o gas se se atopase só no recipiente. Calcúlanse as presións parciais supoñendo comportamento ideal.

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

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

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

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

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

Calcúlase a constante de equilibrio en función das presións:

$$K_p = \frac{p_e^2(\text{IBr})}{p_e(\text{Br}_2) \cdot p_e(\text{I}_2)} = \frac{(0,0176 \text{ atm})^2}{0,0016 \text{ atm} \cdot 0,0016 \text{ atm}} = 120$$

Pero non sería necesario, xa que se pode deducir a relación entre  $K_p$  e  $K_c$ , supoñendo comportamento ideal para os gases:

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

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

4. Introdúcese fósxeno ( $\text{COCl}_2$ ) nun recipiente baleiro de  $2 \text{ dm}^3$  de volume a unha presión de  $0,82 \text{ atm}$  e unha temperatura de  $227^\circ \text{C}$ , producíndose a súa descomposición segundo o equilibrio:

$\text{COCl}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{CO}(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g})$ . Sabendo que nestas condicións o valor de  $K_p$  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

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

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

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

$K_p = 0,189$

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

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

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

$p_t = \sum p_i$

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

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

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

**Solución:**

a) Constrúese unha táboa, baixo a ecuación da reacción, na que se chama  $x$  á presión parcial de fósxeno que se disocia, e complétase atendendo á estequiometría da reacción. Escríbense as presións no equilibrio en función de  $x$ , restando as presións que reaccionaron das presións iniciais dos reactivos, e sumándooas ás dos produtos:

		$\text{COCl}_2$	$\rightleftharpoons$	$\text{CO}$	$\text{Cl}_2$	
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

Substitúense as presións no equilibrio na ecuación da constante de equilibrio en función das presións:

$$K_p = \frac{p_e(\text{CO}) \cdot p_e(\text{Cl}_2)}{p_e(\text{COCl}_2)} \Rightarrow 0,189 = \frac{x \cdot x}{0,820 - x}$$

Resólvese a ecuación de segundo grao:

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

$$x = \frac{-0,189 \pm \sqrt{0,189^2 - 4 \cdot 1 \cdot (-0,155)}}{2 \cdot 1} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 0,310 \\ x_2 = -0,500 \end{cases}$$

Tómase a solución positiva ( $x = 0,310$ ), porque a outra daría presións negativas no equilibrio.

Calcúlanse 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) A presión parcial dun gas nunha mestura é a que exercería o gas se se atopase só no recipiente. Calcúlanse as concentracións supoñendo comportamento ideal.

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

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

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

## ◇ 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  $T_2 > T_1$ :

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

A constante diminúe ao aumentar a temperatura.

**ACLARACIÓNS**

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](#), e de o [tradutor da CIXUG](#).

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> .....	17
<u>CUESTIÓN</u> .....	23

## Índice de probas A.B.A.U.

2017.....	
1. (ord.).....	6
2. (extr.).....	9
2018.....	
1. (ord.).....	12
2. (extr.).....	16
2019.....	
1. (ord.).....	5
2. (extr.).....	11, 24
2020.....	
1. (ord.).....	14, 23
2. (extr.).....	22
2021.....	
1. (ord.).....	20
2. (extr.).....	19
2022.....	
1. (ord.).....	13
2. (extr.).....	7
2023.....	
1. (ord.).....	3
2. (extr.).....	17
2024.....	
1. (ord.).....	2
2. (extr.).....	1