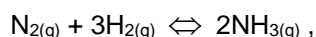


7.2.14 Considera la reacció química de formació de l'amoníac:



la qual presenta una constant d'equilibri $K_p=6.76 \cdot 10^5$ a 298K. En un recipient proveït d'un èmbol, i que inicialment té la capacitat d'un litre, s'aboquen 1 mol de N_2 i 3 mols de H_2 . Es deixa evolucionar el sistema fins assolir l'equilibri. Calcula el grau d'avenç de la reacció en les tres situacions que segueixen:

- quan el sistema ha assolit l'equilibri.
- quan el volum del sistema es dobla.
- si es recupera el volum inicial del sistema però llavors s'hi afegixen 2 mols de gas amoníac.

Comenta els teus resultats en relació al principi de Le Chatelier. Considera que la pressió estàndard és $P^0=1 \text{ atm}$.

Sol.: a) $\xi=0.9956$; b) $\xi=0.9938$; c) $\xi=0.9938$

Solució:

El problema es pot resoldre emprant l'expressió que relaciona K_p amb K_x o la que relaciona K_p amb K_c . Atès que a la constant K_c apareixen concentracions (mols dividit per volum), la solució és més planera per aquesta via. La relació que considerem és doncs

$$K_c = K_p \left(RT \frac{c^0}{P^0} \right)^{-\Delta v} = 4.0365 \cdot 10^8,$$

on s'ha considerat que la pressió estàndard és $P^0=1 \text{ atm}$ i la concentració estàndard és $c^0=1 \text{ mol/litre}$.

En base a l'ordre en què estan ordenats els compostos a la reacció química escrita més amunt, s'obté que

<i>Els mols inicials són</i>	<i>1</i>	<i>3</i>	<i>0</i>
<i>Els mols a l'equilibri són</i>	<i>$1(1-\xi)$</i>	<i>$3(1-\xi)$</i>	<i>2ξ</i>

Apartat a):

Les concentracions a l'equilibri són, en molaritat, $1(1-\xi)/1$, $3(1-\xi)/1$ i $2\xi/1$, respectivament. Es números de cada denominador tenen unitats de litre i els que apareixen més a l'esquerra de cada numerador tenen unitats de mol. Així, la constant d'equilibri K_c és

$$4.0365 \cdot 10^8 = \prod_i \left(\frac{c_i}{c^0} \right)^{v_i} = \frac{\left(\frac{2\xi}{1} \frac{1}{c^0} \right)^2}{\left(\frac{1(1-\xi)}{1} \frac{1}{c^0} \right)^1 \left(\frac{3(1-\xi)}{1} \frac{1}{c^0} \right)^3} = \frac{(2\xi)^2}{27(1-\xi)^4}.$$

Aquí les unitats de concentració s'han simplificat totes. Aquesta equació de quart grau es pot simplificar traient arrel quadrada:

$$20091.1 = \frac{2\xi}{3\sqrt{3}(1-\xi)^2} \quad \text{és a dir,} \quad 52198.1 = \frac{\xi}{(1-\xi)^2},$$

que ja és una equació de segon grau. La solució que es troba en l'interval $[0, 1]$ és $\xi_a=0.9956$

Apartat b):

Les concentracions a l'equilibri, en molaritat, ara passen a ser $1(1-\xi)/2$, $3(1-\xi)/2$ i $2\xi/2$, respectivament. No es tracta de les mateixes concentracions de l'apartat anterior dividides per dos, perquè aquí el valor del grau d'avenç ha canviat (tot i que fem el mateix símbol per designar-lo). Així, atès que el valor de la constant d'equilibri K_c es manté (cal recordar que només depèn de la temperatura), tenim ara que

$$4.0365 \cdot 10^8 = \frac{\left(\frac{2\xi}{2}\right)^2}{\left(\frac{1(1-\xi)}{2}\right)^1 \left(\frac{3(1-\xi)}{2}\right)^3} = \frac{4(2\xi)^2}{27(1-\xi)^4}.$$

Es tracta de la mateixa equació de més amunt, però apareix un factor addicional de 4. L'equació de segon grau que cal solucionar ara és

$$52198.2 = \frac{\xi}{(1-\xi)^2},$$

La solució d'interès és $\xi_b=0.993829$ i l'equilibri s'ha desplaçat lleugerament cap a l'esquerra. D'acord amb el principi de Le Chatelier, atès que, en augmentar el volum, la pressió ha disminuït i la reacció s'ha desplaçat cap al costat on hi ha més mols de gas.

Apartat c):

Les concentracions a l'equilibri, en molaritat, són $1(1-\xi)/1$, $3(1-\xi)/1$ i $(2\xi+2)/1$. Exceptuant la tercera, les altres concentracions tenen la mateixa expressió que les del primer apartat (però el valor numèric del grau d'avenç és diferent!). Ara cal solucionar l'equació

$$52198.1 = \frac{\xi + 1}{(1-\xi)^2},$$

i ara el grau d'avenç és $\xi_c=0.993819$ i l'equilibri s'ha desplaçat lleugerament cap a l'esquerra. Això era d'esperar perquè hem afegit un producte.