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

$$N_{2(g)} + 3H_{2(g)} \Leftrightarrow 2NH_{3(g)} ,$$

la qual presenta una constant d'equilibri K_P=6.76·10^5 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:

a) quan el sistema ha assolit l'equilibri.
b) quan el volum del sistema es dobla.
c) si es recupera el volum inicial del sistema però llavors s'hi afegeixen 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 atm.

Sol.: a) ξ=0.9956; b) ξ=0.9938; c) ξ=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

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

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

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

Els mols inicials són	*1*	*3*	*0*
Els mols a l'equilibri són	*1(1-ξ)*	*3(1-ξ)*	*2ξ*

Apartat a):

Les concentracions a l'equilibri són, en molaritat, 1(1-ξ)/1, 3(1-ξ)/1 i 2ξ/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

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

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

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

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

Apartat b):

Les concentracions a l'equilibri, en molaritat, ara passen a ser 1(1-ξ*)/2, 3(1-*ξ*)/2 i 2*ξ*/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 emprem 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*

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

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 ξ_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-ξ*)/1, 3(1-*ξ*)/1 i (2*ξ*+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 ξ_c*=0.993819 i l'equilibri s'ha desplaçat lleugerament cap a l'esquerra. Això era d'esperar perquè hem afegit un producte.*