

## PROBLEMA 14

En un reactor, que opera a 20 atm y 25°C, se colocaron 30 moles de un gas AB<sub>3</sub>, el cual se descompuso de acuerdo con la reacción: 2 AB<sub>3</sub> (g) ↔ A<sub>2</sub> (g) + 3 B<sub>2</sub> (g). Al llegar al estado de equilibrio, el sistema realizó un trabajo mecánico de 59230 Joule. **a)** Calcular La composición final alcanzada por el sistema (mol/L) y K<sub>c</sub>. **b)** Calcular el calor intercambiado con el medio. **c)** Calcular la variación de energía interna que experimenta el sistema. **d)** Indique 2 formas de aumentar la formación de productos.

**Datos:** ΔH<sub>reacción</sub> = -5,43 Kcal/mol de AB<sub>3</sub> (considere el calor liberado por mol de AB<sub>3</sub> que reacciona)

**Rta:** a) [AB<sub>3</sub>] = 0,092 M; [A<sub>2</sub>] = 0,182 M; [B<sub>2</sub>] = 0,545 M; K<sub>c</sub> = 3,47, b) Q = -544 kJ, c) ΔU = -603 kJ

a)



Inicio(moles)	30	0	0
Equilibrio(moles)	30-2x	x	3x

Considerando gas ideal

Volumen inicial  $V_0 = n_0RT/p = 30\text{mol} \cdot 0,082\text{atmL/molK} \cdot 298\text{K} / 20\text{atm}$

$$V_0 = 36,65\text{L}$$

El sistema realiza trabajo contra una presión externa constante de 20atm

$$1\text{atmL} = 101\text{joule}$$

$$W = -59230 \text{ joule} = -586,43 \text{ atmL}$$

$$W = -\int p_{\text{ext}} dV \text{ como } p_{\text{ext}} = \text{cte luego } W = -p_{\text{ext}} \int dV = -P_{\text{ext}} \Delta V$$

$$W = -P_{\text{ext}} \Delta V \rightarrow -586,43 \text{ atmL} = -20\text{atm} \cdot (V_f - 36,65\text{L}) \rightarrow V_f = 65,97\text{L}$$

Volumen final  $V_f = 65,97\text{L}$  (mayor al inicial, el sistema gaseoso se expande)

$$W = -p_{\text{ext}} \Delta V \text{ considerando proceso reversible } p_{\text{ext}} + dp = p_{\text{interna del sist gas}} \quad W = -p_{\text{int}} \Delta V$$

Considerando gas ideal  $PV=nRT$   $V= nRT/p$

$V_f =$  volumen final del sistema gaseoso en equilibrio  $= (n_{A_2}+n_{B_2}+n_{AB_3})_{eq} RT/p_{interna}$

$V_0 =$  volumen inicial del sistema gaseoso  $= n_{AB_3} RT/p_{interna}$

$W = -p_{int}(V_f-V_0)=-p_{int}[(n_{A_2}+n_{B_2}+n_{AB_3})_{eq} RT/p_{interna} - n_{AB_3} RT/p_{interna}] =$

$W= -p_{int}RT/p_{int}((n_{A_2}+n_{B_2}+n_{AB_3})_{eq} - n_{AB_3}) = -\Delta nRT$  siendo  $\Delta n= \Sigma n_{eq} - \Sigma n_0$

$-59230 \text{joule} = -(30-2x+x+3x-30) \cdot 8,31 \text{joule/molKelvin} \cdot 298K$   $x=11,95 \text{ mol}$

Concentraciones en el equilibrio

$$[AB_3]_{eq} = (30-2x)/V_{final} = 0,092M$$

$$[A_2]_{eq} = x/V_{final} = 0,181M \quad K_c = [A_2]_{eq} [B_2]_{eq}^3 / [AB_3]_{eq}^2$$

$$[B_2]_{eq} = 3x/V_{final} = 0,543M \quad K_c = 0,181 \cdot 0,543^3 / 0,092^2 = 3,42$$

b)

$\Delta H_{reacción} = -5,43 \text{ Kcal/mol}$  de  $AB_3$  (considerar el calor liberado por mol de  $AB_3$  descompuesto)

Calor intercambiado a presión constante  $Q_p = \Delta H = n_{AB_3 \text{ reaccionantes}} \cdot \Delta H_{reacción}$

$$Q_p = 2x \cdot \Delta H_{reacción}$$

$$Q_p = 2 \cdot 11,95 \text{ mol} \cdot -5,43 \text{ kcal/mol} = -129,78 \text{ kcal} = -542,47 \text{ kJoule}$$

c) Aplicando el primer principio a sistemas cerrados (sin intercambio de masa)  $\Delta U = Q+W = -542,47 \text{ kJoule} + (-59,23 \text{ kJoule}) = -601,7 \text{ kJoule}$

d) El principio de Le Chatelier enuncia que si a un sistema se lo aparta del equilibrio, este evolucionará de tal modo de atenuar la perturbación.

Por lo tanto para favorecer la formación de productos se puede:

Disminuir la presión del sistema. Este se desplazará hacia el mayor número de moles de sustancias gaseosas (productos).

Bajar la temperatura del sistema. De este modo la reacción se desplazará hacia la formación de productos, dado que es exotérmica.