TRABAJO PRACTICO Nº 9

EQUILIBRIO QUIMICO

Constante de Equilibrio "K"

1. Escribir la constante de equilibrio para las siguientes ecuaciones químicas y sus inversas que se encuentran en estado gaseoso.

1.1 $N_2 + 3\,H_2 \rightleftharpoons 2NH_3$ $\qquad$ $2NH_3 \rightleftharpoons N_2 + 3\,H_2$

$K_c=\frac{[NH3]^2}{[N2][H2]^3}$ $\quad$ $K_p=\frac{PNH3^2}{PN2\times PH2^3}$ $\qquad$ $K_c=\frac{[N2][H2]^3}{[NH3]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PN2\times PH2^3}{PNH3^2}$

1.2 $2\,SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2\,SO_3$ $\qquad$ $2\,SO_3 \rightleftharpoons 2\,SO_2 + O_2$

$K_c=\frac{[SO3]^2}{[O2][SO2]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PSO3^2}{PO2\times PSO2^2}$ $\qquad$ $K_c=\frac{[O2][SO2]^2}{[SO3]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PO2\times PSO2^2}{PSO3^2}$

1.3 $2\,NOBr \rightleftharpoons 2NO + Br_2$ $\qquad$ $2NO + Br_2 \rightleftharpoons 2\,NOBr$

$K_c=\frac{[Br2][NO]^2}{[NOBr]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PBr2\times PNO^2}{PNOBr^2}$ $\qquad$ $K_c=\frac{[NOBr]^2}{[Br2][NO]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PNOBr^2}{PBr2\times PNO^2}$

1.4 $2\,H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2\,H_2O$ $\qquad$ $2\,H_2O \rightleftharpoons 2\,H_2 + O_2$

$K_c=\frac{[H2O]^2}{[O2][H2]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PH2O^2}{PO2\times PH2^2}$ $\qquad$ $K_c=\frac{[O2][H2]^2}{[H2O]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PO2\times PH2^2}{PH2O^2}$

1.5 $N_2O_4 \rightleftharpoons 2NO_2$ $\qquad$ $2NO_2 \rightleftharpoons N_2O_4$

$K_c=\frac{[NO2]^2}{[N2O4]}$ $\quad$ $K_p=\frac{PNO2^2}{PN2O4}$ $\qquad$ $K_c=\frac{[N2O4]}{[NO2]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PN2O4}{PNO2^2}$

1.6 $2\,CO + O_2 \rightleftharpoons 2\,CO_2$ $\qquad$ $2\,CO_2 \rightleftharpoons 2\,CO + O_2$

$K_c=\frac{[CO2]^2}{[O2][CO]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PCO2^2}{PO2\times PCO^2}$ $\qquad$ $K_c=\frac{[O2][CO]^2}{[CO2]^2}$ $\quad$ $K_p=\frac{PO2\times PCO^2}{PCO2^2}$

2.1 Calcular el valor de K a (1000 K) para la ecuación 1.1 si:
$[N_2]$ = 1.03 mol/L; $[H_2]$ = 1,62 mol/L; $[NH_3]$ = 0,102 mol/L

$$N_2 + 3\,H_2 \rightleftharpoons 2NH_3$$

$K_c = \frac{[NH3]^2}{[N2][H2]^3}$ $K_c = \frac{[0,102]^2}{[1,03][1,62]^3}$ $K_c = 2,38 \times 10^{-3}$

2.2 Expresar la constante de equilibrio en función de las presiones parciales usar la expresión: PV = n RT P= (n/V). R T

$PNH_3 = \frac{0,102\ mol \times 0,082\ L\ atm \times 1000K}{L \quad K\ mol} = 8,36$ atm

$PN_2 = \frac{1,03\ mol \times 0,082\ L\ atm \times 1000K}{L \quad K\ mol} = 84,46$ atm

$PH_2 = \frac{1,62\ mol \times 0,082\ L\ atm \times 1000K}{L \quad K\ mol} = 132,84$ atm

$K_p = \frac{PNH3^2}{PN2 \times PH2^3}$ $K_p = \frac{8,36^2}{84,46 \times 132,84^3}$ $K_p = 3,53 \times 10^{-7}$

Equilibrio homogéneo y heterogéneo

3. Escribir la expresión de la constante de equilibrio para las ecuaciones:

3.1 $2\,NO_2\,(g) \rightleftharpoons N_2O_4\,(g)$

$K_c = \frac{[N2O4]}{[NO2]^2}$ $K_p = \frac{PN2O4}{PNO2^2}$

3.2 $BaCO_3\,(s) \rightleftharpoons BaO\,(s) + CO_2\,(g)$

$K_c = [CO_2]$ $K_p = PCO_2$

3.3 $2\,H_2\,(g) + O_2\,(g) \rightleftharpoons 2\,H_2O\,(l)$

$K_c = \frac{1}{[O2] \times [H2]^2}$ $K_p = \frac{1}{PO2 \times PH2^2}$

Cálculo de la K de equilibrio y las concentraciones

4. Grado de descomposición del reactivo en el equilibrio = 14 %
Recipiente = 1 L. Temperatura = 230 º C

$$PCl_5\ (g) \rightleftharpoons PCl_3\ (g) + Cl_2\ (g)$$

conc*. inicial [mol/L]	1	0	0
cambio [mol/L]	-0,14	0,14	0,14
conc. equil. [mol/L]	1- 0,14	0,14	0,14

*conc¨= concentración en Molaridad [mol/L]

4.1 Calcular la concentración de c/u en el equilibrio

$[PCl_3]$= 0,14 mol/L $[Cl_2]$= 0,14 mol/L $[PCl_5]$= (1-0,14) mol/L $[PCl_5]$= 0,86 mol/L

4.2 Calcular la K de equilibrio.

$Kc=\frac{[Cl2]\times[PCl3]}{[PCl5]}$ $Kc=\frac{[0,14]\times[0,14]}{[0,86]}$ Kc= 0,023

5. Grado de descomposición del reactivo en el equilibrio = 25 %
Volumen del recipiente = 2 L

$$2\ HI\ (g) \rightleftharpoons H_2\ (g) + I_2\ (g)$$

1 mol 0 mol + 0 mol (estado inicial)

	$2\ HI\ (g)$	$\rightleftharpoons$ $H_2\ (g)$	$+ I_2\ (g)$
Conc. Inicial (mol/L)	0,5	0	0
Cambio (mol/L)	- 0,25	0,125	0,125
Conc. Equilibrio (mol/L)	0,5 – 0,25	0,125	0,125

5.1 Calcular los moles de cada uno en el equilibrio

Mol= Conc. Molar x Volumen Volumen = 2L

mol HI = 0,5 mol H_2= 0,25 mol I_2= 0,25

5.2 Calcular la concentración [mol/L] de cada uno en el equilibrio

[HI]= 0,25M [H_2]=0,125M [I_2]=0,125M

5.3 Calcular la k de equilibrio

$K_c=\frac{[H2][I2]}{[HI]^2}$ $K_c=\frac{[0,125][0,125]}{[0,25]^2}$ K_c= 0,25

Predicción del sentido de una reacción

6. Tomando la inversa de la ecuación anterior a 400 ºC (k equilibrio = 64)

H_2 (g) + I_2 (g) $\rightleftharpoons$ 2 HI (g)

0,2 0,2 0 conc. inicial en [mol/L]

Recipiente = 1 L

6.1 Calcular la concentración de c/u en el equilibrio

	H_2 (g)	+ I_2 (g)	$\rightleftharpoons$ 2 HI (g)
Conc. Inicial (M)	0,2	0,2	0
Cambio (M)	-x	-x	2x
Conc. Equilibrio (M)	0,2-x	0,2-x	2x

$K_c=\frac{[HI]^2}{[H2][I2]}$ $K_c=\frac{[2x]^2}{[0,2-x][0,2-x]}$ $64=\frac{[2x]^2}{[0,2-x]^2}$ $\sqrt{64}=\frac{[2x]}{[0,2-x]}$ 8 [0,2-x] =[2x]

X=0,16

[HI] = 0,32M [H_2]=0,04M [I_2]=0,04M

7. H_2 (g) + I_2 (g) $\rightleftharpoons$ 2 HI (g) Keq = 50

1,5 1,5 3 conc. inicial en [mol/L]

7.1 Calcular la concentración de c/u en el equilibrio

Con las concentraciones iniciales calculamos el cociente de reacción:

$Q_c=\frac{[3]^2}{[1,5][1,5]}$ $Q_c=4$ $Q_c < K_c$ por lo tanto la reacción se desplazará $\longrightarrow$ para alcanzar una nueva situación de equilibrio

	H_2 (g)	+ I_2 (g)	$\rightleftharpoons$	2 HI (g)
Conc. Inicial (M)	1,5	1,5		3
Cambio (M)	-x	-x		+2x
Conc. Equilibrio (M)	1,5-x	1,5-x		3+2x

$K_c=\frac{[HI]^2}{[H2][I2]}$ $50=\frac{[3+2x]^2}{[1,5-x][1,5-x]}$ $7,07=\frac{[3+2x]}{[1,5-x]}$ $7,07\,[1,5-x]=[3+2x]$

$10,6-3=7,07x+2x$ $x=0,84$

[HI] = 4,68M $[H_2]=0,66M$ $[I_2]=0,66M$

Factores que influyen en los cambios químicos (Le Chatelier)

8. Dada la ecuación 1.6 analizar la variación de los parámetros como influyen en el equilibrio de una reacción.

$2\,CO\,(g) + O_2\,(g) \rightleftharpoons 2\,CO_2\,(g)$

Cambio	El equilibrio se desplaza hacia la
Aumenta la concentración de producto(s)	izquierda
Decrece la concentración de producto(s)	derecha
Aumenta la concentración de reactivo(s)	izquierda
Decrece la concentración de reactivo(s)	derecha

Igual cantidad de moles a ambos lados de la reacción cambios en P y V no afectan el equilibrio
Los cambios en temperatura afectan el valor de la constante de equilibrio:
Un aumento de temperatura favorece una reacción endotérmica.
Una disminución en la temperatura favorece una reacción exotérmica.
La presencia de un catalizador no afecta el equilibrio químico sólo consigue que el equilibrio se alcance más rápidamente. Afecta la cinética de reacción.

CINETICA QUIMICA

Velocidad de reacción y estequiometría

9. Escriba las expresiones de velocidad para cada reacción en función de la desaparición de reactivos y aparición de productos.

a) $N_2 + 3\ H_2 \longrightarrow 2NH_3$

$V=\frac{-\Delta[N_2]}{\Delta t}$ $V=\frac{-1\Delta[H_2]}{3\Delta t}$ $V=\frac{1\Delta[NH_3]}{2\Delta t}$

b) $2\ NOBr \longrightarrow 2NO + Br_2$

$V=\frac{-1\Delta[NOBr]}{2\Delta t}$ $V=\frac{1\Delta[NO]}{2\Delta t}$ $V=\frac{\Delta[Br_2]}{\Delta t}$

c) $3\ O_{2\ (g)} \longrightarrow 2\ O_{3\ (g)}$

$V=\frac{-1\Delta[O_2]}{3\Delta t}$ $V=\frac{1\Delta[O_3]}{2\Delta t}$

d) $2\ SO_2 + O_2 \longrightarrow 2\ SO_3$

$V=\frac{-1\Delta[SO_2]}{2\Delta t}$ $V=\frac{-1\Delta[O_2]}{\Delta t}$ $V=\frac{1\Delta[SO_3]}{2\Delta t}$

e) $2\ H_2 + O_2 \longrightarrow 2\ H_2O$

$V=\frac{-\Delta[H_2]}{2\Delta t}$ $V=\frac{-1\Delta[O_2]}{\Delta t}$ $V=\frac{1\Delta[H_2O]}{2\Delta t}$

f) $2\ CO + O_2 \longrightarrow 2\ CO_2$

$V=\frac{-1\Delta[CO]}{2\Delta t}$ $V=\frac{-\Delta[O_2]}{\Delta t}$ $V=\frac{1\Delta[CO_2]}{2\Delta t}$

Ley de velocidad

10. Considere la reacción: $A + B \longrightarrow$ Productos

10.1 A partir de los siguientes datos obtenidos a cierta temperatura, determine el orden de reacción y calcule la constante de velocidad.

A (M)	B(M)	Velocidad (M/s)
1,5	1,5	$3,2 \times 10^{-1}$
1,5	2,5	$3,2 \times 10^{-1}$
3,0	1,5	$6,4 \times 10^{-1}$

$V=k[A]^x [B]^y$

De la tabla inferimos:
De acuerdo con las filas 1 y 3 duplicando [A] se duplica la velocidad x=1
De acuerdo con las filas 1 y 2 duplicando [B] la velocidad permanece cte y=0

Por lo tanto, la expresión de la ley de velocidad es: v=k[A]

Podemos llegar a la expresión de la Ley de velocidad aplicando un método sistemático:

$$\frac{velocidad\ 3}{velocidad\ 1} = \frac{k[3]^x[1,5]^y}{k[1,5]^x[1,5]^y} = [2]^x = \frac{6,4 \times 10^{-1}\left(\frac{M}{s}\right)}{3,2 \times 10^{-1}\left(\frac{M}{s}\right)} = 2 \qquad [2]^x=2 \qquad x=1$$

$$\frac{velocidad\ 2}{velocidad\ 1} = \frac{k[1,5]^x[2,5]^y}{k[1,5]^x[1,5]^y} = [1,66]^y = \frac{3,2 \times 10^{-1}\left(\frac{M}{s}\right)}{3,2 \times 10^{-1}\left(\frac{M}{s}\right)} = 1 \qquad [1,66]^y=1 \qquad y=0$$

Una vez calculado el orden de reacción de cualquier fila podemos obtener el valor de la constante de velocidad:

$$k= \frac{3,2 \times 10^{-1}\left(\frac{M}{s}\right)}{1,5M} \qquad k= 0,21\ s^{-1}$$

10.2 Considere la reacción A $\longrightarrow$ B
La velocidad de la reacción es $1,6 \times 10^{-2}$ M/s cuando la concentración de A es 0,35M. Calcular la constante de velocidad si la reacción es:

a) de primer orden respecto de A

$$k= \frac{1,6 \times 10^{-2}\left(\frac{M}{s}\right)}{0,35M} \qquad k= 0,046\ s^{-1}$$

b) de segundo orden respecto de A

$$k= \frac{1,6 \times 10^{-2}\left(\frac{M}{s}\right)}{[0,35M]^2} \qquad k= 0,13\ M^{-1}\ s^{-1}$$

Relación entre concentración de reactivos y tiempo

11. Cuál es la vida media de un compuesto si 75 % de una muestra de este compuesto se descompone en 60 minutos. Suponga una cinética de primer orden.

Primero debemos averiguar el valor de k para poder calcular $t_{1/2}$

$\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$ $[A]_0$=1 M [A]=(1-0,75)M t= 60min x 60s/min = 3600s

$k=\frac{\ln[A_0]-\ln[A]}{t}=\frac{ln\frac{1}{0,25}}{3600\ s}$ $\boxed{k= 3,85 \times 10^{-4}\ s^{-1}}$

Para una reacción de primer orden la expresión de $t_{1/2}$ es:

$t_{½} = \frac{\ln 2}{k}$ $t_{½} = \frac{\ln 2}{3,85\times10^{-4}s^{-1}}$ $\boxed{t_{1/2}= 1800\ s}$

12. La descomposición térmica de la fosfina PH_3 en fósforo e hidrógeno molecular es una reacción de primer orden: $4\ PH_3\ (g) \longrightarrow P_4\ (g) + 6\ H_2\ (g)$
La vida media de la reacción es 35 s a 680˚C, calcular:
a) La constante de velocidad de primer orden para la reacción.

$t_{½} = \frac{\ln 2}{k}$ $t_{½} = 35\ s$ $k= \frac{\ln 2}{35\ s}$ $\boxed{k = 1,98 \times 10^{-2}\ s^{-1}}$

b) El tiempo requerido para que se descomponga el 95% de fosfina.

$\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$ $[A]_0$=1 M [A]=(1-0,95)M k= $1,98 \times 10^{-2}\ s^{-1}$

$t=\frac{\ln[A_0]-\ln[A]}{k}=\frac{ln\frac{1}{0,05}}{1,98\times10^{-2}s^{-1}}$ $\boxed{t=151\ s}$

13. La constante de velocidad para la reacción de segundo orden es 0,8/(Mxs) a 10 ˚ C
$2\ NOBr \longrightarrow 2NO + Br_2$
a) Empezando con una concentración de 0,086 M, calcule la concentración de NOBr después de 22 s

Como la reacción es de segundo orden, para calcular la concentración luego de transcurrido un tiempo t debemos utilizar la expresión:

$$\frac{1}{[NOBr]} = \frac{1}{[NOBr]0} + kt$$

De acuerdo con la información que tenemos en el enunciado:

t=22 s k=0,8 $M^{-1}s^{-1}$ $[NOBr]_0$=0,086M

reemplazando en la expresión:

$$\frac{1}{[NOBr]} = \frac{1}{0{,}086\text{M}} + 0{,}8\ M^{-1}s^{-1} \times 22\ s$$ entonces: [NOBr]= $3{,}42 \times 10^{-2}$M

b) Calcule la vida media cuando $[NOBr]_0$ = 0,072 M y cuando $[NOBr]_0$ =0,054 M

La expresión para el cálculo de tiempo de vida media de una reacción de segundo orden es:

$t_{1/2} = \frac{1}{k[NOBr]0}$ sabemos que k=0,8 $M^{-1}s^{-1}$

cuando $[NOBr]_0$=0,072M: $t_{1/2} = \frac{1}{0{,}8\ M^{-1}s^{-1} \times 0{,}072\text{M}}$ $t_{1/2}$= 17s

cuando $[NOBr]_0$=0,054M: $t_{1/2} = \frac{1}{0{,}8\ M^{-1}s^{-1} \times 0{,}054\text{M}}$ $t_{1/2}$= 23s

Constante de velocidad y su dependencia con la energía de activación y la temperatura.

14. La variación de la constante de velocidad con la temperatura para la reacción de primer orden:

$$2\ N_2O_5(g) \longrightarrow 2\ N_2O_4\ (g) + O_2\ (g)$$

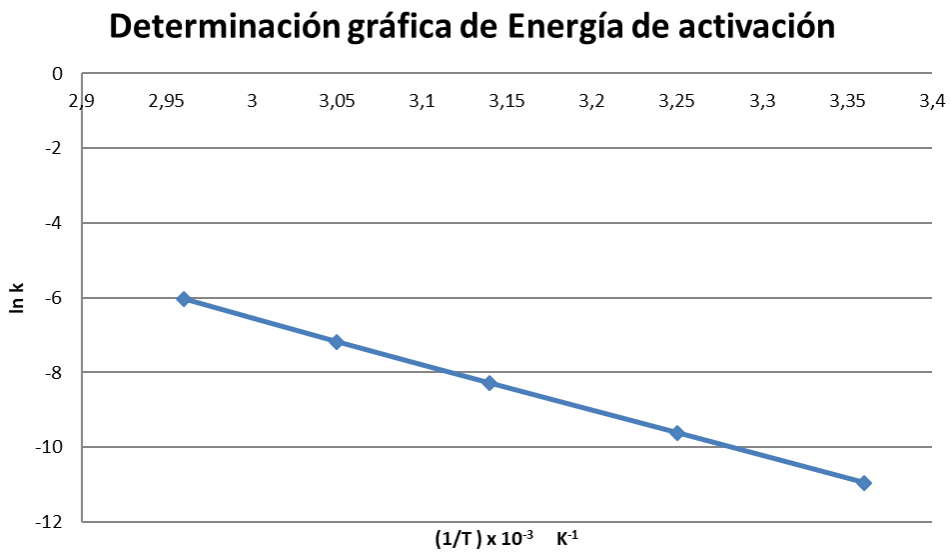
Está dada en la siguiente tabla. Determine gráficamente la energía de activación para la reacción.

T (K)	k (s^{-1})
298	$1{,}74 \times 10^{-5}$
308	$6{,}61 \times 10^{-5}$
318	$2{,}51 \times 10^{-4}$
328	$7{,}59 \times 10^{-4}$
338	$2{,}4 \times 10^{-3}$

Con ayuda de una hoja de cálculos transformamos los datos de la tabla:

1/T [K^{-1}]	lnk
$3{,}36x10^{-3}$	-10,96
$3{,}25x10^{-3}$	-9,62
$3{,}14x10^{-3}$	-8,29
$3{,}05x10^{-3}$	-7,18
$2{,}96x10^{-3}$	-6,03

Luego graficamos:



Calculamos la pendiente de la recta:

Pendiente= $\frac{-7{,}18-(-6{,}03)}{(-3{,}05x10^{-3}-2{,}96x10^{-3})K^{-1}}$ Pendiente= -1,28 x 10^4 K

De acuerdo con la expresión:

ln k= $\frac{-Ea}{R}\frac{1}{T}$ +lnA la pendiente es igual a: $\frac{-Ea}{R}$

despejando: Ea= 8,314 J K^{-1} mol^{-1} x 1,28 x 10^4 K Ea= $1{,}06x10^5$J mol^{-1}

15. La constante de velocidad para una reacción de primer orden es 4,6 x 10^{-4} s^{-1} a 350˚ C. Si la energía de activación es 104 kJ/mol, calcule la temperatura a la cual la constante de velocidad será 8,8 x 10^{-4} s^{-1}. 2

$$\ln k_1 - \ln k_2 = \frac{-Ea}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

sabemos que: $k_1 = 4{,}6 \times 10^{-4}\ s^{-1}$ $k_2 = 8{,}8 \times 10^{-4}\ s^{-1}$ Ea= 104.000J/mol

T_1= (350°C +273°C) K/°C T_1= 623K R=8,314$JK^{-1}mol^{-1}$

Reemplazamos y despejamos T_2:

$$\ln 4{,}6 \times 10^{-4} - \ln 8{,}8 \times 10^{-4} = \frac{-104000 Jmol^{-1}}{8{,}314 JK^{-1}mol^{-1}}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{623K}\right)$$

$$\frac{1}{T_2} = (-0{,}649)\times\left(\frac{8{,}314 JK^{-1}mol^{-1}}{-104000 Jmol^{-1}}\right) + 0{,}0016\ K^{-1}$$ T_2= 606K

Trabajo Práctico n ˚ 9

Ejercicios complementarios:

1. El cloruro de carbonilo ($COCl_2$), también llamado fosgeno, es un gas venenoso. Las concentraciones en el equilibrio a 74˚C para la reacción entre monóxido de carbono y cloro molecular que produce cloruro de carbonilo

$$CO(g)+Cl_2(g) \rightleftharpoons COCl_2\,(g)$$

son: [CO] = $1{,}2x10^{-2}$ M, [Cl_2] = 0,054 M y [$COCl_2$]= 0,14 M

a) Calcule el valor de K_c

$Kc=\frac{[COCl_2]}{[CO][Cl_2]}$ reemplazando con los valores de concentraciones:

$Kc=\frac{0{,}14}{1{,}2x10^{-2}0{,}054}$ Kc= 216,05

b) Calcule el valor de K_p

La expresión que relaciona los valores de Kc y Kp es:

$Kp= Kc\ (RT)^{\Delta n}$ donde: R=0,082 Lx atm x K^{-1}xmol^{-1} T=(74°C +273°C) K/°C

Δn = moles de productos gaseosos – moles de reactivos gaseosos

Reemplazamos:

$Kp= 216{,}05\ (0{,}082x347)^{-1}$ Kp=614,75

2. Considere el equilibrio a 295 K: $NH_4HS(s) \rightleftharpoons NH_3(g) + H_2S\ (g)$
La presión parcial de cada gas es 0,265 atm .
a) Calcule el valor de K_p

Se trata de un equilibrio heterogéneo, debemos recordar que los sólidos y los líquidos puros no aparecen en la expresión de la constante de equilibrio:

$Kp= [NH_3] \times [H_2S]$ Kp=0,265 x 0,265 Kp= 0,07

b) Calcule el valor de K_c

sabemos que: $K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$ por lo tanto Kc será igual a:

$$K_c = \frac{0{,}07}{(0{,}082 x 295)^2} \qquad K_c = 1{,}19 \times 10^{-4}$$

3. Una mezcla de 0,2975 mol de H_2, 0,41 mol de I_2 y 0,369 mol de HI se coloca en un recipiente de acero de 1L de volumen a 430˚C. La constante de equilibrio K_c para la reacción:

$H_2 (g) + I_2 (g) \rightleftharpoons 2\ HI(g)$ es 54,3 a esa temperatura.

Calcule las concentraciones de H_2, I_2 e HI en el equilibrio.

Con las concentraciones iniciales calculamos el cociente de reacción:

$$Q_c = \frac{[0{,}369]^2}{[0{,}2975][0{,}41]} \qquad Q_c = 1{,}12 \quad Q_c < K_c$$ por lo tanto la reacción se desplazará $\longrightarrow$

para alcanzar una nueva situación de equilibrio

	H_2 (g)	+ I_2 (g)	$\rightleftharpoons$	2 HI (g)
Conc. Inicial (M)	0,2975	0,41		0,369
Cambio (M)	-x	-x		+2x
Conc. Equilibrio (M)	0,2975-x	0,41-x		0,369 + 2x

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H2][I2]} \qquad 54{,}3 = \frac{(0{,}369+2x)^2}{(0{,}2975-x)(0{,}41-x)} \qquad 50{,}3x^2 - 40{,}3x + 6{,}48 = 0$$

$X_1 = 0{,}226 \qquad X_2 = 0{,}5697$

Cuando los dos valores de X son números positivos, debemos tener presente que una especie química no puede disociarse en una proporción mayor a su concentración inicial, descartamos el X_2 por este motivo.

De esta manera calculamos con X_1 las concentraciones en el equilibrio:

$[H_2] = (0{,}2975 - 0{,}226)$ M $\qquad [H_2] = 0{,}0715$ M

$[I_2] = (0{,}41 - 0{,}226)$ M $\qquad [I_2] = 0{,}184$ M

$[HI] = (0{,}369 + 0{,}452)$ M $\qquad [HI] = 0{,}821$ M

4. A 2000˚ C, la constante de equilibrio de la reacción:

$$N_2(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2\,NO(g) \quad \text{es } K_c = 0{,}1$$

Si se colocan 0,5 mol de $N_2(g)$ y 0,5 mol de $O_2(g)$ en un volumen de 1 L. Calcular la concentración de todas las especies en el equilibrio.

	N_2 (g)	+ O_2 (g)	$\rightleftharpoons$	2 NO (g)
Conc. Inicial (M)	0,5	0,5		
Cambio (M)	-x	-x		+2x
Conc. Equilibrio (M)	0,5 - x	0,5 - x		2x

$K_c=\frac{[NO]^2}{[N2][O2]}$ $\quad 0{,}1=\frac{(2x)^2}{(0{,}5-x)^2}$ $\quad 0{,}316=\frac{2x}{(0{,}5-x)}$ $\quad x=0{,}068$

$[N_2]=(0{,}5 – 0{,}068)$ M $\quad [N_2]=0{,}432$ M

$[O_2]=(0{,}5 – 0{,}068)$ M $\quad [O_2]=0{,}432$ M

[NO]==,136 M

5. En fase gaseosa los átomos de yodo se combinan para formar yodo molecular:

$$I(g) + I(g) \longrightarrow I_2(g)$$

Esta reacción sigue una cinética de segundo orden y el valor de la constante de velocidad es de $7{,}0 \times 10^9$/(Mxs) a 23˚ C.

a) Si la concentración inicial de I(g) era de 0,086M, calcule la concentración después de 2 min.

Como la reacción es de segundo orden, para calcular la concentración luego de transcurrido un tiempo t debemos utilizar la expresión:

$$\frac{1}{[I]} = \frac{1}{[I]0} + kt$$

De acuerdo con la información que tenemos en el enunciado:

t=120 s $\quad k=7{,}0 \times 10^9\ M^{-1}s^{-1} \quad [I]_0=0{,}086M$

reemplazando en la expresión:

$\frac{1}{[I]} = \frac{1}{0{,}086\text{M}} + 7{,}0 \times 10^{9}\ M^{-1}s^{-1} \times 120\ s$ entonces: $[I] = 1{,}2\times10^{-12}$ M

b) Calcule la vida media de la reacción si la concentración inicial de I(g) es de 0,6M y si es de 0,42 M.

La expresión para el cálculo de tiempo de vida media de una reacción de segundo orden es:

$t_{1/2} = \frac{1}{k[I]0}$ sabemos que $k = 7{,}0 \times 10^{9}\ M^{-1}s^{-1}$

cuando $[I]_0 = 0{,}6$ M: $t_{1/2} = \frac{1}{7{,}0x10^{9}\ M^{-1}s^{-1} \times 0{,}6\text{M}}$ $t_{1/2} = 2{,}38\times10^{-11}$s

cuando $[I]_0 = 0{,}42$ M: $t_{1/2} = \frac{1}{7{,}0x10^{9}\ M^{-1}s^{-1} \times 0{,}42\text{M}}$ $t_{1/2} = 3{,}4\times10^{-10}$s

6.La constante de velocidad de segundo orden de la descomposición del óxido nitroso (N_2O) en una molécula de nitrógeno y un átomo de oxígeno se ha medido a diferentes temperaturas:

k [1/Mxs]	t [˚C]
1,87x10-3	600
0,0113	650
0,0569	700
0,244	750

Determine en forma gráfica el valor de la energía de activación para la reacción.

Con ayuda de una hoja de cálculos transformamos los valores:

ln k	1/T [K^{-1}]
-6,281816848	0,001145475
-4,482952553	0,001083424
-2,866459938	0,001027749
-1,410587054	0,000977517

Graficamos:

Con la función PENDIENTE en la hoja de cálculos determinamos su valor:

Pendiente= $-3{,}45 \times 10^{-5}$

De acuerdo con la expresión:

$\ln k = \frac{-Ea}{R}\frac{1}{T} + \ln A$ la pendiente es igual a: $\frac{-Ea}{R}$

despejando: $Ea = 8{,}314\ J\ K^{-1}\ mol^{-1} \times 3{,}45 \times 10^{-5}\ K$ $Ea = 2{,}87 \times 10^{-4} J\ mol^{-1}$

7. La constante de velocidad de una reacción de primer orden es $3{,}46 \times 10^{-2}\ s^{-1}$ a 298K ¿Cuál es la constante de velocidad a 350 K si la energía de activación para la reacción es 50,2 kJ/mol?

$$\ln k_1 - \ln k_2 = \frac{-Ea}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

sabemos que: $k_2 = 3{,}46 \times 10^{-2}\ s^{-1}$ $Ea = 50.200$ J/mol

$T_2 = 298$ K $T_1 = 350$ K $R = 8{,}314 JK^{-1}mol^{-1}$

Reemplazamos y despejamos k_1:

$$\ln k_1 - \ln 3{,}46 \times 10^{-2} = \frac{-50200 Jmol^{-1}}{8{,}314 JK^{-1}mol^{-1}}\left(\frac{1}{298K} - \frac{1}{350K}\right)$$

$k_1 = 1{,}79 \times 10^{-3}\ s^{-1}$