

III- OREKA KIMIKOA

1. Kc-ren kalkulua
2. Orekaren kalkuluak
3. Temperaturaren eragina
4. Orekaren gaineko eraginak

1. K_c-REN KALKULUA

1 Adibidea: 400 °C-tan $2 \text{ SO}_2 (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{ SO}_3 (\text{g})$ erreakzioaren $\Delta_r H^\circ = -197,78 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ $\Delta_r S^\circ = -188,06 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ dira. Zein da K_c-aren balioa ?

K_p kalkulua:

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \cdot \Delta S^\circ \qquad \Delta G^\circ = -197,78 - 673 \cdot (-188,06 \cdot 10^{-3}) = -71,22 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta G^\circ = -RT \cdot \ln K \qquad -71,22 = -8,314 \cdot 10^{-3} \cdot 673 \cdot \ln K \qquad K = 3,37 \cdot 10^5$$

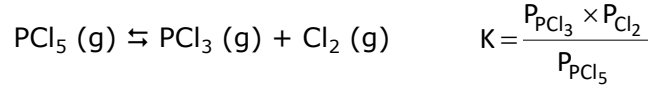
K_c kalkulua:

$$K_p = \frac{P_{\text{SO}_3}^2}{P_{\text{SO}_2}^2 \times P_{\text{O}_2}} = \frac{([\text{SO}_3]RT)^2}{([\text{SO}_2]RT)^2 ([\text{O}_2]RT)}$$

$$K_p = \frac{[\text{SO}_3]^2}{[\text{SO}_2]^2 [\text{O}_2]} (RT)^{-1} = K_c \cdot (RT)^{-1} \qquad K_c = 3,37 \cdot 10^5 \cdot (0,083 \text{ bar} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 673 \text{ K})^{-1} \qquad K_c = 1,88 \cdot 10^7$$

2. OREKAREN KALKULUA

2 Adibidea: Demagun 500 mL-ko ontzi batean 3,12 g PCl_5 jartzen dira. 250 °C-tan deskonposatzen da fosforo triklorurota eta klorota oreka lortu arte. Hiru substantziak gasak direla eta $K=78,3$ dela jakinda, determinatu orekako nahastearen konposizioa $\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ -tan. Zein da deskonposatzen den PCl_5 -aren proportzioa?



	$\text{PCl}_5 (\text{g}) \rightleftharpoons \text{PCl}_3 (\text{g}) + \text{Cl}_2 (\text{g})$		
Hasieran:	P_0		
Orekan:	$P_0 - x$	x	x

$$K = \frac{x \cdot x}{P_0 - x}$$

$$P_0 = \frac{nRT}{V} = \frac{\frac{3,12 \text{ g}}{208,24 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \cdot 0,083 \text{ bar} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 523 \text{ K}}{0,5 \text{ L}} = 1,30 \text{ bar}$$

$$78,3 = \frac{x^2}{1,30 - x} \rightarrow x = \begin{cases} -79,6 \text{ ezin} \\ 1,28 \end{cases}$$

$$P_{\text{PCl}_5} = 1,30 - 1,28 = 0,02 \text{ bar} \rightarrow \frac{n}{V} = \frac{P}{RT} = \frac{0,02 \text{ bar}}{0,083 \cdot 523 \text{ K}} = 4,6 \cdot 10^{-4} \text{ M}$$

$$P_{\text{PCl}_3} = P_{\text{Cl}_2} = 1,28 \text{ bar} \rightarrow 2,94 \cdot 10^{-2} \text{ M}$$

$$\text{Deskonposatzen den proportzioa: } \frac{1,28}{1,30} \times 100 = \%98,5$$

3. TEMPERATURAREN ERAGINA

3 Adibidea: Amoniako sintesirako oreka-konstantearen balioa 298 K-etan $6,8 \cdot 10^5$ da. Zein da balioa 400 K-etan?



$$\ln K = \frac{-\Delta H^\circ}{RT} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$$

Bi balio ditugunez, Van 't Hoff-en ekuazioa erabili behar dugu: $\ln \frac{K_1}{K_2} = \frac{-\Delta H^\circ}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$

Horretarako erreakzioaren $\Delta_r H^\circ$ kalkulatu behar da

$$\Delta_r H^\circ = 2 \cdot \Delta_f H^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) - \Delta_f H^\circ(\text{H}_2, \text{g}) - 3 \cdot \Delta_f H^\circ(\text{N}_2, \text{g})$$

$$\Delta_r H^\circ = 2 \cdot (-46,11) - 0 - 0$$

$$\Delta_r H^\circ = -92,22 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\ln \frac{6,8 \cdot 10^5}{K_{400}} = \frac{92,22 \cdot 10^3 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}}{8,3145 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}} \cdot \left(\frac{1}{298} - \frac{1}{400} \right)$$

$$K_{400} = 51$$

Erreakzioa exotermikoa denez, temperatura igotzean K-aren balioa gutxitzen da.

4. OREKAREN GAINEN ERAGINAK

4 Adibidea: 3. adibidea hartuko dugu, non PCl_5 -aren deskonposizioa ikasi dugu 500 mL-ko ontzi batean.



Orekan: 0,02 bar 1,28 bar 1,28 bar

Demagun oreka lortu ondoren ontzian 0,0100 mol Cl_2 sartzen direla. Zein da oreka berriaren konposizioa?

Produktu bat bota dugunez, sistema errektibo gehiago lortuz erantzungo du :

	$\text{PCl}_5(\text{g})$	\rightleftharpoons	$\text{PCl}_3(\text{g})$	+	$\text{Cl}_2(\text{g})$
t=0 (bar):	0,02		1,28		2,15
t=∞:	0,02+x		1,28-x		P(Cl_2)-x= 2,15-x

$$P_{\text{Cl}_2} = 1,28 \text{ bar} + \frac{0,0100 \text{ mol} \cdot 0,083 \text{ bar} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 523 \text{ K}}{500 \cdot 10^{-3} \text{ L}} = 2,15 \text{ bar}$$

$$78,3 = \frac{(1,28-x) \cdot (2,15-x)}{0,02+x} \rightarrow x = \begin{cases} 81,72 \text{ ezin} \\ 0,0145 \end{cases}$$

Oreka berrian :

$$P_{\text{PCl}_5} = 0,02 + 0,0145 = 0,0345 \text{ bar}$$

$$P_{\text{PCl}_3} = 1,28 - 0,0145 = 1,2655 \text{ bar}$$

$$P_{\text{Cl}_2} = 2,15 - 0,0145 = 2,1355 \text{ bar}$$