

Relación con termodinámica

Ejercicio 1

Reacción: $N_2(g) + 3H_2(g) \rightleftharpoons 2NH_3(g)$

Datos: A 298 K, $K = 4 \times 10^8$

Pregunta:

- a) ¿Qué indica el valor tan grande de K sobre la posición del equilibrio?
b) Calcula ΔG° a 298 K.

Solución:

a) K muy grande $\rightarrow$ la reacción favorece fuertemente los productos (NH_3).

b) $\Delta G^\circ = -RT \ln K$

- R = 8,314 J/mol·K
- T = 298 K
- K = 4×10^8

$$\Delta G^\circ = -(8,314)(298) \ln(4 \times 10^8)$$

$$\ln(4 \times 10^8) = \ln(4) + \ln(10^8) \approx 1,386 + 18,420 \approx 19,806$$

$$\Delta G^\circ \approx -8,314 \times 298 \times 19,806 \approx -49.0 \times 10^3 \text{ J/mol} \approx -49 \text{ kJ/mol}$$

Resultado: $\Delta G^\circ < 0 \rightarrow$ reacción espontánea en condiciones estándar.

Ejercicio 3

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

Datos: K = 55 a 700 K

Pregunta:

Si se introduce 1 mol de H_2 y 1 mol de I_2 en 1 L, ¿la reacción avanzará hacia productos o reactivos?

Solución:

- Kc = 55 $\rightarrow$ la reacción favorece fuertemente la formación de HI.
- C inicial: $[H_2] = [I_2] = 1 \text{ M}$, $[HI] = 0$
- Cociente de reacción $Q_c = [HI]^2 / ([H_2][I_2]) = 0$
- Como $Q < K \rightarrow$ la reacción avanzará hacia los productos hasta alcanzar el equilibrio.

Ejercicio 5

Reacción: $C(s) + O_2(g) \rightleftharpoons CO_2(g)$

Datos: A 298 K, $K_p = 10^4$

Pregunta:

- a) Interpreta el valor de K_p .
b) Calcula ΔG° a 298 K.

Solución:

a) K muy grande $\rightarrow$ la reacción favorece fuertemente los productos (CO_2).

b) $\Delta G^\circ = -RT \ln K_p$

$$\ln(10^4) = 4 \ln 10 \approx 4 \times 2,303 \approx 9,21$$

$$\Delta G^\circ = -8,314 \times 298 \times 9,21 \approx -22,8 \times 10^3 \text{ J/mol} \approx -22,8 \text{ kJ/mol}$$

Resultado: $\Delta G^\circ < 0 \rightarrow$ reacción espontánea bajo condiciones estándar.

Ejercicio 8

Reacción: $H_2(g) + Cl_2(g) \rightleftharpoons 2HCl(g)$

Datos: A 400 K, $K_c = 4$

Pregunta:

Si se introducen 1 M de H_2 y 1 M de Cl_2 , calcula ΔG° y explica si la reacción es espontánea.

Solución:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K = -8,314 \times 400 \times \ln 4$$

$$\ln 4 \approx 1,386$$

$$\Delta G^\circ \approx -8,314 \times 400 \times 1,386 \approx -4,61 \times 10^3 \text{ J/mol} \approx -4,61 \text{ kJ/mol}$$

Resultado: $\Delta G^\circ < 0 \rightarrow$ espontánea hacia HCl.

Ejercicio 2

Reacción: $CO(g) + Cl_2(g) \rightleftharpoons COCl_2(g)$

Datos: A 400 K, $K = 2 \times 10^{-3}$

Pregunta:

- a) ¿Qué indica este valor tan pequeño de K?
b) Calcula ΔG° a 400 K.

Solución:

a) $K \ll 1 \rightarrow$ la reacción favorece los reactivos (CO y Cl_2).

b) $\Delta G^\circ = -RT \ln K$

$$\ln(2 \times 10^{-3}) = \ln 2 + \ln 10^{-3} \approx 0,693 - 6,908 \approx -6,215$$

$$\Delta G^\circ = -(8,314)(400)(-6,215) \approx 20,7 \times 10^3 \text{ J/mol} \approx 20,7 \text{ kJ/mol}$$

Resultado: $\Delta G^\circ > 0 \rightarrow$ no espontánea bajo condiciones estándar.

Ejercicio 4

Reacción: $2SO_2(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2SO_3(g)$

Datos: A 700 K, $K = 1,0 \times 10^2$

Pregunta:

- a) ¿ ΔG° es positivo o negativo?
b) ¿La reacción es espontánea?

Solución:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K$$

$$\ln(1,0 \times 10^2) \approx \ln(100) \approx 4,605$$

$$\Delta G^\circ = -8,314 \times 700 \times 4,605 \approx -26,8 \times 10^3 \text{ J/mol} \approx -26,8 \text{ kJ/mol}$$

Resultado: $\Delta G^\circ < 0 \rightarrow$ reacción espontánea hacia formación de SO_3 .

Ejercicio 6

Reacción: $2NO(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2NO_2(g)$

Datos: A 500 K, $K = 1,0 \times 10^5$

Pregunta:

Si se mezclan inicialmente 0,1 M de NO y 0,05 M de O_2 , ¿hacia dónde se desplazará la reacción? Calcula ΔG° .

Solución:

1. Cociente de reacción:

$$Q_c = \frac{[NO_2]^2}{[NO]^2[O_2]} = \frac{0^2}{(0,1)^2(0,05)} = 0$$

2. Comparando con K : $Q < K \rightarrow$ la reacción avanzará hacia los productos.

3. $\Delta G^\circ = -RT \ln K$

$$\ln(1 \times 10^5) \approx 11,513$$

$$\Delta G^\circ = -8,314 \times 500 \times 11,513 \approx -47,8 \times 10^3 \text{ J/mol} \approx -47,8 \text{ kJ/mol}$$

Conclusión: reacción espontánea hacia NO_2 .

Ejercicio 9

Reacción: $N_2O_4(g) \rightleftharpoons 2NO_2(g)$

Datos: A 350 K, $K = 5 \times 10^{-3}$

Pregunta:

- a) ¿Hacia qué lado favorece el equilibrio el valor de K?
b) Calcula ΔG° .

Solución:

a) $K \ll 1 \rightarrow$ favorece fuertemente a N_2O_4 (reactivo).

b) $\Delta G^\circ = -RT \ln K$

$$\ln(5 \times 10^{-3}) = \ln 5 + \ln 10^{-3} \approx 1,609 - 6,908 \approx -5,299$$

$$\Delta G^\circ = -8,314 \times 350 \times (-5,299) \approx 15,4 \times 10^3 \text{ J/mol} \approx 15,4 \text{ kJ/mol}$$

Resultado: $\Delta G^\circ > 0 \rightarrow$ reacción no espontánea hacia productos.