

Clase 2 Agosto 2021

Título de la nota


02/08/2021

N6 : X ✓ fx =BUSCARV(L6,BW28:CB50,6)

Instrucción: escoger un catión y un anión solamente, llenar en las celdas de color amarillo los coeficientes correspondientes							
Al		Cl		Al		Cl	
ES (kJ/mol)		EI (kJ/mol)		AE (kJ/mol)		ED (kJ/mol)	
322.20	I	II	III	IV	-349.00	244.00	
577.40	1816.60	2744.60	0.00				
Coef	1.0	1.0	1.0	0.0	3.0	1.5	
el simulador solo contempla para los cationes de aluminio y magnesio: cloruro de magnesio, bromuro de aluminio y cloruro de aluminio							
ES		Energía de sublimación		Br			
EI		Energía de Ionización		AE (kJ/mol)		EA (kJ/mol)	
AE		Afinidad electrónica		-325.00		112.00	
ED		Energía de disociación		Coef		0.0	
EA		Energía de atomización					
U		Energía reticular					
ΔH_f		Entalpía de formación					
Coef		Coeficientes		Obtención de ΔH_f calculada		-712.20 kJ/mol	
						EXOTÉRMICO	
<p>por ejemplo para el compuesto $AlCl_3$ tendría el coeficiente de 1 en las 3 EI del aluminio un coeficiente de 1.5 en ED para el cloruro un coeficiente de 3 en AE para el cloruro en los aniones Br ó I se agrega el coeficiente de cero</p> <p>Martin, L. J. Phys. Chem. Ref. Data, 3, 771-9 (1974)</p> <p>Andersen, T. "Binding Energies in Atomic Negative Ions: III." J. Phys. Chem. Ref. Data. 28, (6), 1511-1533, (1999).</p>							

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2020

Con apoyo del programa DGAPA-UNAM-PAPIME PE-200419

Na		Cl				Na	Cl	NaCl (s)	U (kJ/mol)	ΔH_f (kJ/mol)
								-788.00	-411.00	
ES (kJ/mol)	EI (kJ/mol)						Datos de referencia			
108.00	I	II	III	IV	AE (kJ/mol)	ED (kJ/mol)				
	496.00	4563.00	6910.00	9544.00	-349.00	244.00	el simulador solo contempla para los cationes de aluminio y magnesio:			
Coef	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.5	cloruro de magnesio, bromuro de aluminio y cloruro de aluminio			
ES	Energía de sublimación				Br		por ejemplo para el compuesto $AlCl_3$ tendría el coeficiente de 1 en las 3 EI del aluminio			
EI	Energía de Ionización						un coeficiente de 1.5 en ED para el cloruro			
AE	Afinidad electrónica				AE (kJ/mol)	EA (kJ/mol)	un coeficiente de 3 en AE para el cloruro			
ED	Energía de disociación				-325.00	112.00	en los aniones Br ó I se agrega el coeficiente de cero			
EA	Energía de atomización				Coef	0.0	0.0			
U	Energía reticular				Martin, L. J. Phys. Chem. Ref. Data, 3, 771-9 (1974)					
ΔH_f	Entalpía de formación				Andersen, T. "Binding Energies in Atomic Negative Ions: III." J. Phys. Chem. Ref. Data. 28, (6), 1511-1533, (1999).					
Coef	Coeficientes				Obtención de ΔH_f calculada	-411.00	kJ/mol			
						EXOTÉRMICO				
										
Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2020										
Con apoyo del programa DGAPA-UNAM-PAPIME PE-200419										

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
4															
5		Na					Cl		Na	Br		NaBr (s)	U (kJ/mol)	ΔH_f (kJ/mol)	
6													-751.00	-360.00	
7	ES (kJ/mol)	EI (kJ/mol)											Datos de referencia		
8	108.00	I	II	III	IV	AE (kJ/mol)	ED (kJ/mol)								
9		496.00	4563.00	6910.00	9544.00	-349.00	244.00	el simulador solo contempla para los cationes de aluminio y magnesio:							
10	Coef	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	cloruro de magnesio, bromuro de aluminio y cloruro de aluminio							
11															
12	ES	Energía de sublimación							Br			por ejemplo para el compuesto $AlCl_3$ tendria el coeficiente de 1 en las 3 EI del aluminio			
13	EI	Energía de Ionización										un coeficiente de 1.5 en ED para el cloruro			
14	AE	Afinidad electrónica										un coeficiente de 3 en AE para el cloruro			
15	ED	Energía de disociación						AE (kJ/mol)	EA (kJ/mol)			en los aniones Br ó I se agrega el coeficiente de cero			
16	EA	Energía de atomización				Coef	1.0	1.0							
17	U	Energía reticular													
18	ΔH_f	Entalpia de formación													
19	Coef	Coeficientes				Obtención de ΔH_f calculada	-360.00	kJ/mol							
20															
21															
22															
23															
24															
25															
26															
27															
28															



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2020

Con apoyo del programa DGAPA-UNAM-PAPIME PE-200419

K { Ley acción de masas
Vreacción (cinético)
[], T, PH, P

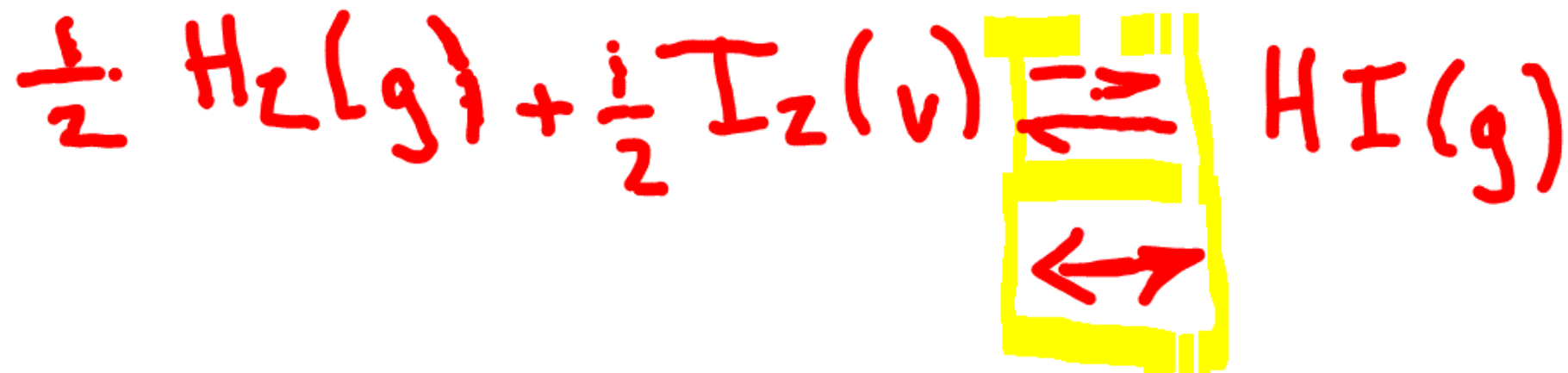
k_e, k

{	$[]$	k_c
	p	k_p
	x, y	$k_x \quad k_y$

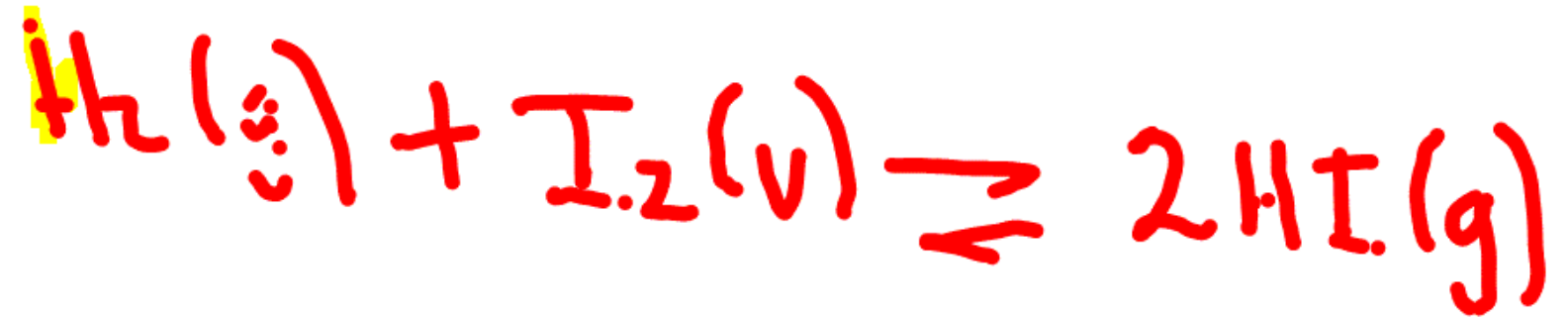
adimensional o dimensional



$$K_c = \frac{[\text{HI}]^2 \text{ (mol/L)}^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2] \left(\frac{\text{mol}}{\text{L}}\right)\left(\frac{\text{mol}}{\text{L}}\right)}$$



$$K_c = \frac{[\text{HI}]}{[\text{H}_2]^{1/2} [\text{I}_2]^{1/2}} \frac{\text{mol/L}}{\left(\frac{\text{mol}}{\text{L}}\right)^{1/2} \left(\frac{\text{mol}}{\text{L}}\right)^{1/2}}$$



$$K_p = \frac{(\text{P}_{\text{HI}})^2}{(\text{P}_{\text{H}_2})(\text{P}_{\text{I}_2})}$$

$$PV = nRT$$

$$P = \left(\frac{n}{V} \right) RT$$

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$

$$\Delta n = 0$$
$$K_c = K_p$$

$$5 - 2\xi = 0$$

$$-2\xi = -5$$

$$\xi = \frac{-5}{-2} = 2.5$$

$$V_c = 59.4$$

$$V_c = \sqrt{59.4} = 7.7$$

$$V_c = (59.4)^2 = 3528.36$$

Q cociente de Rx

$$Q_R = \frac{3^2}{8' 5'} = \frac{9}{40}$$

0.225

$Q_R < K_c \rightarrow$ Derecha

$$K_c = \frac{(3 + 2\xi)^2}{(8 + \xi)(5 + \xi)} = 59.4$$



se introducen inicialmente las siguientes moles: 8 $\text{H}_2(\text{g})$ 5 $\text{I}_2(\text{g})$ 3 $\text{HI}(\text{g})$

la evolución en el número de mole será:

n	H_2	=	8	-	1 ξ	
n	I_2	=	5	-	1 ξ	
n	HI	=	3	+	2 ξ	

$$K_c = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]} = 59.4$$

$$59.4 = \frac{(3 + 2\xi)^2}{(8 - \xi)(5 - \xi)}$$

se genera una ecuación cuadrática solo

$$55.40 \xi^2 - 784.20 \xi + 2367.00 = 0$$

Resolución de la ecuación $\xi_1 = 9.79185$ $\xi_2 = 4.36339$

por lo tanto las moles al equilibrio son:

n	H_2	=	8	-	1	4.3634	=	3.6366
n	I_2	=	5	-	1	4.3634	=	0.6366
n	HI	=	3	+	2	4.3634	=	11.7268

se elige la raíz que no obtenga valores negativos
insertar 4.36339

comprobación $K_c = 59.4001$ adimensional

$$K_c = \frac{(11.72)^2}{(0.6366)(3.6366)}$$

$$K_c = 59.4$$



$\text{H}_2(\text{g}) + 1 \text{I}_2(\text{g}) \leftrightarrow 2 \text{HI}(\text{g})$ $K_c = 59.4$

se introducen inicialmente las siguientes moles: 8 $\text{H}_2(\text{g})$ 5 $\text{I}_2(\text{g})$ 0 $\text{HI}(\text{g})$

la evolución en el número de mole será:

n	H_2	=	8	-	1	ξ	
n	I_2	=	5	-	1	ξ	
n	HI	=	0	+	2	ξ	

$$K_c = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]} = 59.4$$

$$59.4 = \frac{(0 + 2\xi)^2}{(8 - 1\xi)(5 - 1\xi)}$$

se genera una ecuación cuadrática solo

$$55.40 \xi^2 - 772.20 \xi + 2376.00 = 0$$

Resolución de la ecuación $\xi_1 = 9.35327$ $\xi_2 = 4.58536$

por lo tanto las moles al equilibrio son:

n	H_2	=	8	-	1	4.5854	=	3.4146
n	I_2	=	5	-	1	4.5854	=	0.4146
n	HI	=	0	+	2	4.5854	=	9.1708

se elige la raíz que no obtenga valores negativos
insertar 4.5853

comprobación $K_c = 59.4006$ adimensional

Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2021
Con apoyo del programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE-202021

