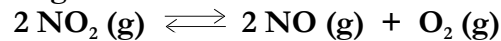


A11.- Un recipiente de 1 litro contiene $5,0 \cdot 10^{-2}$ moles de NO_2 y se calienta hasta 327°C , estableciéndose el equilibrio siguiente:



La constante K_c para el equilibrio a 327°C vale $1,56 \cdot 10^{-6}$. Calcula el porcentaje de disociación en esas condiciones.

$$V=1 \text{ L}$$

$$T=327^\circ\text{C}=600 \text{ K}$$

$$K_c=1,56 \cdot 10^{-6} \text{ mol L}^{-1}$$

	$2 \text{NO}_2(\text{g})$	\rightleftharpoons	$2 \text{NO}(\text{g})$	+	$\text{O}_2(\text{g})$
concentración inicial	$5 \cdot 10^{-2}$		-		-
concentración en el equilibrio	$5 \cdot 10^{-2}(1-\alpha)$		$5 \cdot 10^{-2}\alpha$		$\frac{5 \cdot 10^{-2}\alpha}{2}$

Aplicamos la Ley de Acción de Masas:

$$K_c = \frac{[\text{NO}]^2 \cdot [\text{O}_2]}{[\text{NO}_2]^2} \Rightarrow 1,56 \cdot 10^{-6} = \frac{(5 \cdot 10^{-2}\alpha)^2 \cdot (\frac{5 \cdot 10^{-2}\alpha}{2})}{(5 \cdot 10^{-2}(1-\alpha))^2} \Rightarrow 1,56 \cdot 10^{-6} = \frac{\alpha^2 \cdot (\frac{5 \cdot 10^{-2}\alpha}{2})}{(1-\alpha)^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 1,56 \cdot 10^{-6} = \frac{\alpha^2 \cdot 5 \cdot 10^{-2}\alpha}{2 \cdot (1-\alpha)^2} \Rightarrow 3,12 \cdot 10^{-6}(1-\alpha)^2 = 5 \cdot 10^{-2}\alpha^3 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 3,12 \cdot 10^{-6}(1+\alpha^2-2\alpha) = 5 \cdot 10^{-2}\alpha^3 \Rightarrow 5 \cdot 10^{-2}\alpha^3 - 3,12 \cdot 10^{-6}\alpha^2 + 6,24 \cdot 10^{-6}\alpha - 3,12 \cdot 10^{-6} = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 16025,641\alpha^3 - \alpha^2 + 2\alpha - 1 = 0$$

Para conocer el grado de disociación necesitamos resolver una ecuación de tercer grado.

Para resolverla tenemos dos métodos:

1) Rigurosamente, utilizando el método iterativo de Newton-Raphson

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

x_n	$f(x_n)$	$f'(x_n)$	x_{n+1}
0,5	2002,95513	12020,2308	0,333368
0,333368	593,28305	5344,32467	0,22235621
0,22235621	175,577937	2378,58811	0,14854017
0,14854017	51,7977347	1062,48096	0,09978849
0,09978849	15,1137885	480,53807	0,06833669
0,06833669	4,24619763	226,377898	0,04957957
0,04957957	1,04979717	120,08034	0,04083711
0,04083711	0,17139777	82,094752	0,03874931
0,03874931	0,00840778	74,1104247	0,03863586
0,03863586	2,3941E-05	73,6885701	0,03863553
0,03863553	1,9597E-10	73,6873638	0,03863553
0,03863553	0	73,6873638	0,03863553
0,03863553	0	73,6873638	0,03863553

La solución de la ecuación por el método iterativo de Newton-Raphson es $\alpha = 0,0386$, por lo que la solución será $\alpha = 3,86\%$

2) Aproximadamente, sólo cuando K_c sea muy pequeña ($K_c \ll 1$, eso se da para valores de $K_c \leq 10^{-5}$)

Como $K_c \ll 1 \Rightarrow$ el equilibrio está muy desplazado a la derecha $\Rightarrow \alpha \ll 1 \Rightarrow (1-\alpha) \simeq 1$

$$3,12 \cdot 10^{-6} (1-\alpha)^2 = 5 \cdot 10^{-2} \alpha^3 \Rightarrow [(1-\alpha) \simeq 1] \Rightarrow 3,12 \cdot 10^{-6} = 5 \cdot 10^{-2} \alpha^3 \Rightarrow \alpha = \sqrt[3]{\frac{3,12 \cdot 10^{-6}}{5 \cdot 10^{-2}}} = 0,0397$$

La solución de la ecuación por aproximación es $\alpha = 0,0397$, por lo que la solución será $\alpha = 3,97\%$