Un recipiente del volume di 150 L alla temperatura di 15°C e alla pressione di 1 atm viene portato alla temperatura di 600°C. Nel riscaldamento, A si decompone in B e C secondo la reazione:

$$2A \implies B + 3C$$

All'equilibrio il 38% di A è dissociato. Calcolare le pressioni parziali di A, B e C nelle suddette condizioni.

$$P_i = n_i RT / V$$

$$2A \Longrightarrow B + 3C$$
Inizio: n_A^0 / /
$$2x = 0.38 n_A^0$$
Equilibrio: $n_A^0 - 2x$ $x = 3x$

 $n_A{}^0 = P_A{}^0 \text{ V } / \text{ RT}^0 = 1 \text{ atm } \cdot 150 \text{ L } / 0,0821 \text{ L atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \cdot 288,15 \text{ K} = 6,341 \text{ mol}^{-1} \cdot 288,15 \text{ M} = 6,341 \text{ mol}^{-1}$

$$P_{A}^{\ eq} = n_{A}^{\ eq} R T^{eq} / \ V = 0.62 \ n_{A}^{\ 0} R T^{eq} / \ V = 0.62 \cdot 6.341 \ \text{mol} \cdot 0.0821 \ \text{L atm K}^{-1} \ \text{mol}^{-1} \cdot 873.15 \ \text{K} / \ 150 \ \text{L} = \textbf{1.879} \ \textbf{atm}$$

$$P_B^{eq} = n_B^{eq} R T^{eq} / V = 0.19 n_A^0 R T^{eq} / V = 0.576 atm$$

$$P_C^{eq} = n_C^{eq}RT^{eq} / V = 0,57 n_A^0RT^{eq} / V = 1,727 atm$$

0,100 moli di monossido di azoto NO sono riscaldate alla temperatura di 2180°C in un recipiente di volume costante 0,450 L. Si stabilisce l'equilibrio:

$$2 \text{ NO (g)} \longrightarrow N_2 (g) + O_2 (g)$$

All'equilibrio sono presenti 0,0485 moli di azoto N₂. Si calcoli:

- a) la costante di equilibrio Kp;
- b) la pressione parziale di NO all'equilibrio.

Inizio:
$$n_{NO}^{0} = 0,100 \text{ mol}$$
 + $O_{2}(g)$ + $O_{2}(g)$

Equilibrio: 0,100 mol - 2x x = 0,0485 mol x = 0,0485 mol

$$n_{NO}^{eq} = (0,100 - 2.0,0485) \text{ mol} = 0,003 \text{ mol}$$

 $n_{totali}^{eq} = 0,100 \text{ mol} - 2x + x + x = 0,100 \text{ mol}$

$$Kp = \frac{P_{N2}^{eq} \cdot P_{O2}^{eq}}{(P_{NO}^{eq})^2}$$

$$P_i = \chi_i P_{totale} \implies Kp = K\chi (P_{totale}^{eq})^{\Delta n}$$

$$\mathbf{Kp} = \frac{\chi_{\text{N2}} \cdot \chi_{\text{O2}}}{\chi_{\text{NO}}^2} \left(P_{\text{totale}}^{\text{eq}} \right)^{\Delta n} = \frac{0.0485}{0.100} \cdot \frac{0.0485}{0.100} \cdot \left(\frac{0.1}{0.003} \right)^2 = \mathbf{261.36}$$

$$\mathbf{P_{NO}}^{eq} = n_{NO}^{eq} \ RT/V = 0,003 \ mol \cdot 0,0821 \ L \ atm \ K^{-1} \ mol^{-1} \cdot 2453,15 \ K \ / \ 0,450 \ L = 1,3427 \ atm = \textbf{1,343} \ atm$$

0,100 moli di monossido di azoto NO sono riscaldate alla temperatura di 2180°C in un recipiente di volume costante 0,450 L. Si stabilisce l'equilibrio:

$$2 \text{ NO (g)} \longrightarrow N_2 (g) + O_2 (g)$$

All'equilibrio sono presenti 0,0485 moli di azoto N₂. Si calcoli:

- a) la costante di equilibrio Kp;
- b) la pressione parziale di NO all'equilibrio.

$$2NO(a)$$

$$2NO (g) \implies N_2 (g) + O_2 (g)$$
Inizio: $n_{NO}^0 = 0,100 \text{ mol}$ /

Equilibrio: 0,100 mol - 2x x = 0,0485 mol x = 0,0485 mol

$$n_{NO}^{eq} = (0,100 - 2.0,0485) \text{ mol} = 0,003 \text{ mol}$$

 $n_{totali}^{eq} = 0,100 \text{ mol} - 2x + x + x = 0,100 \text{ mol}$

$$Kp = \frac{P_{N2}^{eq} \cdot P_{O2}^{eq}}{(P_{NO}^{eq})^2}$$

$$\boldsymbol{P_{NO}}^{eq} = n_{NO}^{eq} \; RT/V = 0,003 \; mol \cdot 0,0821 \; L \; atm \; K^{-1} \; mol^{-1} \cdot 2453,15 \; K \; / \; 0,450 \; L = 1,3427 \; atm = \boldsymbol{1,343} \; atm = \boldsymbol{1,343} \; atm = \boldsymbol{1,3427} \; atm = \boldsymbol{$$

$$P_{N2}^{\ eq} = P_{O2}^{\ eq} = n_{N2}^{\ eq} RT \ / \ V = 0.0485 mol \cdot 0.0821 \ L \ atm \ K^{-1} mol^{-1} \cdot 2453,15 \ K \ / \ 0.450 \ L = 21,7068 \ atm$$

$$\mathbf{Kp} = \frac{P_{\text{N2}}^{\text{eq}} \cdot P_{\text{O2}}^{\text{eq}}}{(P_{\text{NO}}^{\text{eq}})^2} = 21,7068 \text{ atm} \cdot 21,7068 \text{ atm} / (1,3427 \text{ atm})^2 = \mathbf{261,36}$$

L'ammoniaca viene prodotta dalla reazione:

$$N_2(g) + 3H_2(g) = 2NH_3(g)$$

La miscela gassosa che entra nel recipiente di reazione per la produzione di ammoniaca contiene

H₂ e N₂ nel rapporto molare 4:1 (4 moli di idrogeno ed 1 mole di azoto). All'uscita del recipiente di reazione, il rapporto molare di questi gas risulta essere 4,65:1. Si calcoli il volume, espresso

 \Rightarrow

in m³ di miscela gassosa, misurato a 500°C e 1 atm, che deve entrare nel reattore per produrre

150 tonnellate di ammoniaca. (m.a.r.: H=1,01; N=14,01. R= 0,0821 L atm mol⁻¹ K⁻¹)

 $N_2(g) + 3H_2(g) \implies 2NH_3(g)$ $N_2(g) + 3H_2(g) \implies 2NH_3(g)$ In. n_{N2}^{0} / In. n_{N2}^{0} /

Eq. $n_{N2}^0 - x n_{H2}^0 - 3x$ All'equilibrio $n_{H2}^{eq} = 4,65 n_{N2}^{eq}$ \Rightarrow $(n_{H2}^0 - 3x) = 4.65 \cdot (n_{N2}^0 - x)$ Ma poichè $n_{H2}^{0} = 4 n_{N2}^{0}$ \Rightarrow $(4 n_{N2}^0 - 3x) = 4.65 \cdot (n_{N2}^0 - x)$

Per $n_{N2}^{0} = 1 \text{ mol}$

x = 0.394 mol $n_{NH3}^{eq} = m_{NH3} / P.M._{NH3}$

Le moli di azoto e idrogeno da introdurre nel reattore, quindi, sono:

 $1:0,788 = n_{N2}^{0}: n_{NH3}^{eq}$ $n_{N2}^0 = 11,17 \cdot 10^6 \,\text{mol}$ $4:0.788 = n_{H2}^{0}: n_{NH3}^{0} = 44.67 \cdot 10^{6} \, \text{mol}$ $\Rightarrow n_{totali} = n_{H2}^{0} + n_{N2}^{0} = 55.84 \cdot 10^{6} \, \text{mol}$

Eq. n_{N2}^{eq} 4,65 n_{N2}^{eq} n_{NH3}^{eq}

 \Rightarrow $(4 \text{ mol} - 3x) = 4.65 \cdot (1 \text{ mol} - x)$ $n_{NH3}^{eq} = 2x = 0.788 \text{ mol}$

 $P.M._{NH3} = 14,01 + 3.1,01 = 17,04$ $n_{NH3}^{eq} = m_{NH3} / P.M._{NH3} = 150 \cdot 10^6 \text{ g} / 17,04 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,80 \cdot 10^6 \text{ mol}$

 $V = n_{totali} RT / P = 55,84 \cdot 10^6 mol \cdot 0,0821 L atm mol^{-1} K^{-1} \cdot 773,15 K / 1 atm = 3,543 \cdot 10^9 L$ $1 L = 10^{-3} \text{ m}^3$ $V = 3.543 \cdot 10^6 \text{ m}^3$

La costante, espressa in termini di concentrazioni, della reazione:

$$H_2(g) + CO(g) \rightleftharpoons CH_2O(g)$$

vale 20 a 773 K.

Calcolare la composizione percentuale in volume del sistema e il rendimento percentuale della reazione se 3 mol di H₂ (g) e 2 mol di CO (g) vengono messe in un recipiente di volume 4 L alla temperatura di 773 K.

Calcolare inoltre il rendimento percentuale, e confrontarlo con quello precedente, se il volume del recipiente viene aumentato fino a 8 L, mantenendo costante la temperatura.

La costante, espressa in termini di concentrazioni, della reazione:

$$H_2(g) + CO(g) \longrightarrow CH_2O(g)$$
 vale 20 a 773 K.

Calcolare la composizione percentuale in volume del sistema e il rendimento percentuale della reazione se 3 mol di H₂ (g) e 2 mol di CO (g) vengono messe in un recipiente di volume 4 L alla temperatura di 773 K.

Calcolare inoltre il rendimento percentuale, e confrontarlo con quello precedente, se il volume del recipiente viene aumentato fino a 8 L, mantenendo costante la temperatura.

$$[A] = n_{A} / V \qquad \qquad Kc = [CH_{2}O]^{eq} / [H_{2}]^{eq} [CO]^{eq}$$

$$H_{2}(g) + CO(g) \Longrightarrow CH_{2}O(g)$$
Inizio: $3 \text{ mol} - x + 2 \text{ mol} - x + x$

$$20 = \frac{x / 4}{[(3 - x) / 4] [(2 - x) / 4]}$$

$$x = \frac{+13 \pm \sqrt{(169 - 150)}}{5}$$

$$x_{1} = \frac{3,472}{3,472}$$

$$x_{2} = 1,728$$

Dal punto di vista fisico, x₁ non è accettabile perché, all'equilibrio, si otterrebbero quantità negative dei reagenti

$$n_{H2}^{eq} = (3 - x) \text{ mol} = (3 - 1,728) \text{ mol} = 1,272 \text{ mol}$$
 $n_{CO}^{eq} = (2 - x) \text{ mol} = (2 - 1,728) \text{ mol} = 0,272 \text{ mol}$
 $n_{CH2O}^{eq} = x = 1,728 \text{ mol}$

La costante, espressa in termini di concentrazioni, della reazione:

$$H_2(g) + CO(g) \longrightarrow CH_2O(g)$$
 vale 20 a 773 K.

Calcolare la composizione percentuale in volume del sistema e il rendimento percentuale della reazione se 3 mol di H₂ (g) e 2 mol di CO (g) vengono messe in un recipiente di volume 4 L alla temperatura di 773 K.

Calcolare inoltre il rendimento percentuale, e confrontarlo con quello precedente, se il volume del recipiente viene aumentato fino a 8 L, mantenendo costante la temperatura.

$$n_{\text{totali}} = n_{\text{H2}}^{\text{eq}} + n_{\text{CO}}^{\text{eq}} + n_{\text{CH2O}}^{\text{eq}} = (1,272 + 0,272 + 1,728) \text{ mol} = 3,272 \text{ mol}$$

$$\begin{array}{ll} n_{\rm H2}\% = (n_{\rm H2}^{\rm eq} \ / \ n_{\rm totali}) \cdot 100 = 38,88 \ \% \\ n_{\rm CO}\% = (n_{\rm CO}^{\rm eq} \ / \ n_{\rm totali}) \cdot 100 = 8,31 \ \% \\ n_{\rm CH2O}\% = (n_{\rm CH2O}^{\rm eq} \ / \ n_{\rm totali}) \cdot 100 = 52,81 \ \% \\ \end{array}$$

Resa % =
$$(n_{\text{ottenute}}/n_{\text{teoriche}}) \cdot 100 = (1,728/2) \cdot 100 = 86,40 %$$

La costante, espressa in termini di concentrazioni, della reazione:

$$H_2(g) + CO(g) \longrightarrow CH_2O(g)$$
 vale 20 a 773 K.

Calcolare la composizione percentuale in volume del sistema e il rendimento percentuale della reazione se 3 mol di H₂ (g) e 2 mol di CO (g) vengono messe in un recipiente di volume 4 L alla temperatura di 773 K.

Calcolare inoltre il rendimento percentuale, e confrontarlo con quello precedente, se il volume del recipiente viene aumentato fino a 8 L, mantenendo costante la temperatura.

$$[A] = n_{A} / V \qquad \qquad Kc = [CH_{2}O]^{eq} / [H_{2}]^{eq} [CO]^{eq}$$

$$H_{2}(g) + CO(g) \Longrightarrow CH_{2}O(g)$$
Inizio: 3 mol 2 mol /
Equilibrio: 1,272 mol 0,272 mol 1,728 mol Resa % = 86,40 %
Equilibrio': 3 mol – x 2 mol – x x
$$20 = \frac{x / 8}{[(3 - x) / 8] [(2 - x) / 8]} \qquad 5x^{2} - 27 x + 30 = 0$$

$$x = \frac{+27 \pm \sqrt{(729 - 600)}}{10} \qquad x_{2} = 1,564$$

Dal punto di vista fisico, x_1 non è accettabile

$$n_{H2}^{eq} = (3 - x) \text{ mol} = (3 - 1,564) \text{ mol} = 1,436 \text{ mol}$$
 $n_{CO}^{eq} = (2 - x) \text{ mol} = (2 - 1,564) \text{ mol} = 0,436 \text{ mol}$
 $n_{CH2O}^{eq} = x = 1,564 \text{ mol}$

La costante, espressa in termini di concentrazioni, della reazione:

$$H_2(g) + CO(g) \longrightarrow CH_2O(g)$$
 vale 20 a 773 K.

Calcolare la composizione percentuale in volume del sistema e il rendimento percentuale della reazione se 3 mol di H₂ (g) e 2 mol di CO (g) vengono messe in un recipiente di volume 4 L alla temperatura di 773 K.

Calcolare inoltre il rendimento percentuale, e confrontarlo con quello precedente, se il volume del recipiente viene aumentato fino a 8 L, mantenendo costante la temperatura.

Resa % '=
$$(n_{\text{ottenute}}/n_{\text{teoriche}}) \cdot 100 = (1,564/2) \cdot 100 = 78,20 %$$