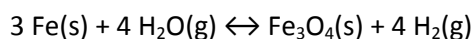


P2. (40%)

En un autoclave evacuado de 5 litros se colocó una mezcla de Hierro sólido (Fe) y 2,91 moles de H_2O . El autoclave se cerró y se calentó a 1260 K. Una vez alcanzado el equilibrio, se detectó que la presión total era de 60 atm y que se había logrado una conversión del 19% del agua alimentado. La reacción que ocurre es:



Considere que el Fe(s) está en exceso, pero desprecie su volumen frente al volumen total. Además, suponga que el hidrógeno se comporta como gas ideal y el agua como un gas real que cumpla la ecuación de Clausius.

$$P \cdot (\bar{V} - b) = RT \quad \text{con } b = 32 \text{ cm}^3/\text{mol}$$

Calcule ΔG° para la reacción a 1260 K.

Algunas relaciones útiles:

$$R = 1,987 \text{ cal/mol K}$$

$$R = 0,082 \text{ L atm/mol K}$$

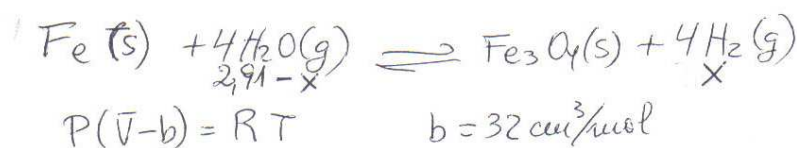
$$\ln(\gamma) = \ln\left(\frac{f}{P}\right) = -\frac{1}{RT} \cdot \int \alpha \cdot dP$$

$$\ln(\gamma) = \ln\left(\frac{f}{P}\right) = -\frac{1}{RT} \cdot \int \alpha \cdot dP$$

$$\alpha = \bar{V}_{ideal} - \bar{V}_{real}$$

Pauta

② $V = 5 \text{ L}$
 $n_{\text{H}_2\text{O}}^\circ = 2,91 \text{ moles}$
 $P = 60 \text{ atm}$
 $T = 1260 \text{ K}$
 Conversión del $\text{H}_2\text{O} = 19\%$



$$\frac{y}{2,91} = 0,19 \Rightarrow y = 0,19 \times 2,91 = 0,5529 \text{ moles}$$

En equilibrio $n_{H_2O} = 2,91 - 0,5529 = 2,3571 \text{ moles}$
 $n_{H_2} = 0,5529 \text{ moles}$

$$n_{\text{total (gas)}} = 2,91 - x + x = 2,91 \text{ moles}$$

$$x_{H_2O} = \frac{2,3571}{2,91} = 0,81$$

$$x_{H_2} = 1 - 0,81 = 0,19$$

$$P_{H_2} = x_{H_2} \cdot P = 0,19 \times 60 = 11,4$$

$$K_f = \frac{f_{H_2}^4}{f_{H_2O}^4} = \frac{P_{H_2}^4}{f_{H_2O}^4} \quad 0,5$$

$$f_{H_2O} = x_{H_2O} f_{H_2O}^* \quad 0,5$$

$$\ln(f_{H_2O}^*) = \ln P - \frac{1}{RT} \int_0^P \alpha dP = \ln(60) - \frac{1}{RT} \int_0^P (\bar{V}_{ideal} - \bar{V}_{real}) dP$$

$$\bar{V}_{ideal} - \bar{V}_{real} = \frac{RT}{P} - \left(\frac{RT}{P} + b \right) = -b$$

$$\ln(f_{H_2O}^*) = \ln(60) + \frac{b}{RT} (P - 0) = \ln 60 + \frac{32 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \times 10^{-3} \frac{\text{atm}}{\text{cm}^3} \times 60 \text{ atm}}{0,082 \text{ atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \times 1260 \text{ K}}$$

$$\ln(f_{H_2O}^*) = 4,0943 + 0,01858 = 4,1129 \Rightarrow f_{H_2O}^* = 61,125 \text{ atm}$$

$$f_{H_2O} = x_{H_2O} f_{H_2O}^* = 0,81 \times 61,125 = 49,51 \text{ atm} \quad 0,5 \quad 2,0$$

$$K_f = \frac{(11,4)^4}{(49,51)^4} = \left(\frac{11,4}{49,51} \right)^4 = 2,811 \times 10^{-3} \quad 0,5$$

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

$$\Delta G^\circ = -1,987 \frac{\text{cal}}{\text{mol K}} \ln(2,811 \times 10^{-3}) \times 1260 \text{ K}$$

$$\Delta G^\circ = 14707 \frac{\text{cal}}{\text{mol}} = 14,707 \frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}$$