

Percorso 4

1) Un contenitore a tenuta da 7,5 litri è riempito con 39,2 g di monossido di carbonio (**CO**) e 142 g di cloro (**Cl₂**). Alla temperatura T avviene la reazione di sintesi del fosgene (**COCl₂**):



Sapendo che la $K_c = 15$, calcola quanto fosgene (**COCl₂**) viene prodotto e il rendimento della reazione rispetto al cloro (**Cl₂**) reagito.

2) Un contenitore alla temperatura T e alla pressione $P = 1 \text{ atm}$ contiene 1 mole di pentacloruro di fosforo (**PCl₅**). In queste condizioni abbiamo la decomposizione del pentacloruro di fosforo (**PCl₅**) in tricloruro di fosforo (**PCl₃**) e cloro (**Cl₂**):



All'equilibrio si hanno 0,25 mol di cloro (**Cl₂**). Calcolare le quantità delle specie reagenti e prodotte se la pressione viene portata a $P_2=2\text{atm}$ e $P_3=3\text{atm}$.

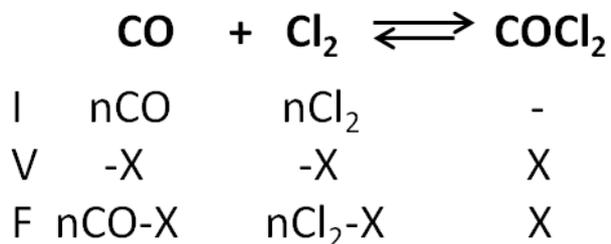
Soluzioni

1) Le moli dei reagenti sono:

$$n_{\text{CO}} = 39,2 \text{ g} / 28,0101 \text{ g/mol} = 1,399 \text{ mol}$$

$$n_{\text{Cl}_2} = 142 \text{ g} / 70,9060 \text{ g/mol} = 2,003 \text{ mol}$$

All'equilibrio abbiamo la seguente situazione:



Per cui le moli all'equilibrio sono:

$$n_{\text{CO}} = 1,399 - X$$

$$n_{\text{Cl}_2} = 2,003 \text{ mol} - X$$

$$n_{\text{COCl}_2} = X$$

Trasformando le moli in concentrazioni molari abbiamo:

$$[\text{CO}] = (1,399 - X) / 7,5$$

$$[\text{Cl}_2] = (2,003 - X) / 7,5$$

$$[\text{COCl}_2] = X / 7,5$$

Inserendo questi valori nella relazione della costante di equilibrio abbiamo:

$$K_c = \frac{[\text{COCl}_2]}{[\text{CO}] \cdot [\text{Cl}_2]} = \frac{[X/7,5]}{[(1,399-X)/7,5] \cdot [(2,003-X)/7,5]} = 15$$

Sviluppando si ha:

$$\frac{7,5X}{1,399-X \cdot 2,003-X} = 15 \quad \longrightarrow \quad X^2 - 3,9X + 2,8 = 0$$

Che è un'equazione di secondo grado che si risolve:

$$X = \frac{3,9 \pm (4)^{0,5}}{2} = \begin{cases} 2,95 \text{ (da scartare)} \\ 0,95 \end{cases}$$

La massa di fosgene (COCl₂) prodotta è data dalla seguente relazione:

$$m_{\text{COCl}_2} = 0,95 \text{ mol} \cdot 98,9161 \text{ g/mol} = 93,9703 \text{ g}$$

le moli dei reagenti all'equilibrio sono:

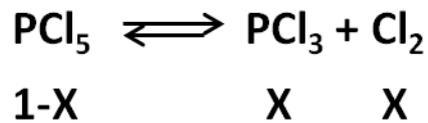
$$n_{\text{CO}} = 1,399 \text{ mol} - 0,95 \text{ mol} = 0,449 \text{ mol}$$

$$n_{\text{Cl}_2} = 2,003 \text{ mol} - 0,95 \text{ mol} = 1,053 \text{ mol}$$

La resa del fosgene (COCl₂) in funzione del cloro (Cl₂) viene data seguente relazione:

$$R = (n\text{COCl}_2 \cdot 100) / n\text{Cl}_2 = (0,95 \cdot 100) / 2,003 = 47,5\%$$

2) All'equilibrio abbiamo:



Quindi:

$$n\text{PCl}_5 = 1 - 0,25 = 0,75 \text{ mol}$$

$$n\text{PCl}_3 = 0,25 \text{ mol}$$

$$n\text{Cl}_2 = 0,25 \text{ mol}$$

le moli totali sono:

$$n_{\text{TOT}} = 0,75 + 0,25 + 0,25 = 1,25 \text{ mol}$$

per cui essendo la pressione 1 atm la K_p è:

$$K_p = (0,25 / 1,25) \cdot (0,25 / 1,25) / (0,75 / 1,25) = 6,6 \cdot 10^{-2}$$

La K_p non varia al variare della pressione e a 2 atm abbiamo la seguente situazione:

$$n\text{PCl}_5 = 1 - X$$

$$n\text{PCl}_3 = X$$

$$n\text{Cl}_2 = X$$

pertanto la K_p sarà:

$$K_p = \frac{[P \cdot (X/1-X)] \cdot [P \cdot (X/1-X)]}{[P \cdot (1-X/1+X)]} = 6,6 \cdot 10^{-2}$$

Sviluppando la relazione matematica si ha:

$$\frac{P \cdot X^2}{1-X^2} = 6,6 \cdot 10^{-2}$$

Sviluppando per $P = 2 \text{ atm}$:

$$X = 0,179$$

Pertanto:

$$n\text{PCl}_5 = 1 - 0,179 = 0,821 \text{ mol}; n\text{PCl}_3 = 0,179 \text{ mol}; n\text{Cl}_2 = 0,179 \text{ mol}.$$

Sviluppando per $P = 3 \text{ atm}$:

$$X = 0,147$$

Pertanto:

$$n\text{PCl}_5 = 1 - 0,147 = 0,853 \text{ mol}; n\text{PCl}_3 = 0,147 \text{ mol}; n\text{Cl}_2 = 0,147 \text{ mol}.$$