

T5A - Equilibrio químico

Martin J. Klöckner - mklockner@fi.uba.ar - kloeckner.com.ar

Química (63.01/83.01) - 2C2022 - FIUBA

Equilibrio	1
Equilibrio químico	1
Equilibrio físico	1
Concentración molar	1
Ley de acción de masas	1
Constante de equilibrio	1
Propiedades de la constante de equilibrio	2
Constante de equilibrio para gases	2
Relación entre constante de equilibrio de concentración y de presión	2
Equilibrio Homogéneo y Heterogéneo	3
Usos de la constante de equilibrio	3
Magnitud de la constante de equilibrio	3
Predicción de la dirección de una reacción	3
Cociente de reacción	3
Cociente de reacción para gases	4
Relación entre el cociente de reacción y la constante de concentración	4
Calculo de las concentraciones en el equilibrio	4
Ejemplo	4
Principio de Le Châtelier	5
Factores que afectan el equilibrio químico	5
Adición de reactivos y productos	5
Variación de volumen y presión de un a mezcla gaseosa	5
Variación de la temperatura	5
Catalizadores	5
Termodinámica y las constantes de equilibrio	5

Equilibrio

El equilibrio de un sistema, es una situación en donde coexisten dos estados al mismo tiempo. Mientras el sistema esté en equilibrio se mantienen constantes todas sus propiedades.

Equilibrio químico

El equilibrio químico es un estado de equilibrio dinámico en el cual la velocidad de formación de los productos es igual a la velocidad de descomposición de estos a reactivos. De manera análoga, la velocidad de la reacción directa es igual a la velocidad de la reacción inversa.

Una reacción química ha alcanzado el equilibrio cuando las concentraciones de todos los reactivos y productos **permanece constante**, a cierta temperatura.

Las velocidades de las reacciones directa e inversa son iguales al alcanzar el estado de equilibrio.

Equilibrio físico

En el equilibrio, la velocidad de evaporación es igual a la velocidad de condensación

Concentración molar

La concentración molar (también llamada molaridad), es una medida de la concentración de un soluto en una disolución

La concentración o molaridad (M), se define como la cantidad de soluto (expresada en moles) por litro de disolución

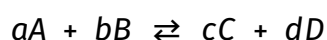
$$M = \frac{n}{V}$$

Ley de acción de masas

La ley de acción de masas establece que para una reacción reversible en equilibrio a una temperatura constante, una relación determinada de concentraciones de reactivos y productos, tienen un valor constante.

Constante de equilibrio

Sea una reacción en equilibrio

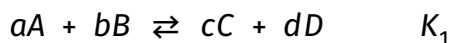


Entonces la constante de equilibrio (K_c) en concentraciones molares se define como

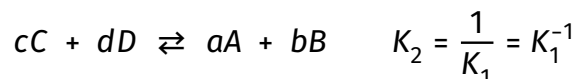
$$K_c = \frac{[C]_{eq}^c \cdot [D]_{eq}^d}{[A]_{eq}^a \cdot [B]_{eq}^b}$$

Propiedades de la constante de equilibrio

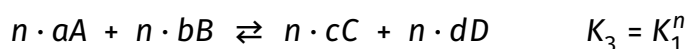
Sea una reacción en equilibrio con su constante de equilibrio K_1



entonces si damos vuelta la reacción, la nueva constante de equilibrio va a ser K_2



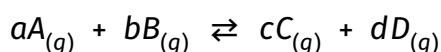
o si multiplicamos la primer reacción por un numero n la constante de equilibrio de la reacción va a ser K_3



Constante de equilibrio para gases

En el caso de gases, las concentraciones se pueden expresar en términos de presión parcial. Generalmente expresadas en atmósferas.

Entonces si tengo una reacción química en la que participan gases



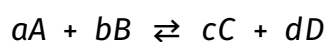
La constante de equilibrio expresadas en términos de presión K_p queda expresada de la siguiente manera

$$K_p = \frac{(P_C)_{eq}^c \cdot (P_D)_{eq}^d}{(P_A)_{eq}^a \cdot (P_B)_{eq}^b}$$

Relación entre constante de equilibrio de concentración y de presión

En un sistema homogéneo gaseoso, la concentración se puede expresar tanto en concentraciones molares como en presiones parciales.

La relación que existe entre ellos se puede expresar de la siguiente manera.



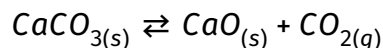
$$K_p = K_c \cdot (RT)^{\Delta n}$$

siendo $\Delta n = (c + d) - (a + b)$

Equilibrio Homogéneo y Heterogéneo

Si todos los reactivos y productos están en una sola fase, el equilibrio es homogéneo, en cambio, si uno o mas, reactivos o productos, están en una fase diferente, el equilibrio es heterogéneo.

Por ejemplo, sea la reacción:



Entonces la expresión de la constante de equilibrio queda expresada de la siguiente manera

$$K_c = \frac{[\text{CaO}]_{(s)}}{[\text{CaCO}_3]_{(s)}} \cdot [\text{CO}_2]_{(g)}$$

$$K_c = \text{cte} \cdot [\text{CO}_2]_{(g)}$$

Usos de la constante de equilibrio

Magnitud de la constante de equilibrio

El valor de la constante de equilibrio (K) indica si el equilibrio esta desplazado hacia los productos o hacia los reactivos. Un valor chico, menor a 1 indica una mayor proporción de reactivos en la reacción, por el contrario un valor de K mayor a 1 indica una mayor proporción de productos en la reacción y por ende un desplazamiento del equilibrio hacia los productos. Por ultimo, si la magnitud de K es igual a 1, habrá una proporción similar en la reacción de reactivos y productos.

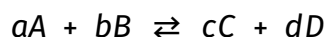
Predicción de la dirección de una reacción

Si tenemos un sistema el cual no esta en equilibrio y tampoco sabemos en que sentido evoluciona, podemos calcular el **cociente de reacción** el cual nos puede ayudar a predecir la dirección en la que evolucionara el sistema.

Cociente de reacción

El cociente de reacción (Q) es la proporción relativa de productos y reactivos presentes en la mezcla de reacción en un momento dado.

Sea una reacción química:



Entonces el cociente de reacción queda expresado de la siguiente manera

$$Q = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

Cociente de reacción para gases

En el caso de los gases es conveniente calcular Q_p que es similar en cuanto al cálculo pero se utilizan las presiones parciales de los gases en vez de sus concentraciones:

$$Q_p = \frac{(P_C)^c \cdot (P_D)^d}{(P_A)^a \cdot (P_B)^b}$$

Relación entre el cociente de reacción y la constante de concentración

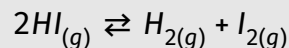
- $Q < K_c$: el sistema evolucionará hacia los productos, es decir, aumentarán las concentraciones de los productos y disminuirán las de los reactivos hasta que Q se iguale con K_c
- $Q = K_c$: entonces el sistema está en equilibrio
- $Q > K_c$: el sistema evolucionará hacia los reactivos, es decir, aumentarán las concentraciones de los reactivos y disminuirán las de los productos hasta que Q se iguale con K_c

Cálculo de las concentraciones en el equilibrio

Ejemplo

En un recipiente de 3 litros se introducen 0,6 moles de yoduro de hidrógeno (HI), 0,3 moles de hidrógeno (H_2) y 0,3 moles de yodo (I_2) a $490^\circ C$.

Si $K_c = 0,022$ a $490^\circ C$ para la siguiente reacción:



1. ¿Se encuentra en equilibrio?
2. En caso de no encontrarse, ¿cuántos moles de HI , H_2 e I_2 habrá en el equilibrio?

Sabiendo las cantidades de moles y el volumen del recipiente, se puede calcular las concentraciones molares de los reactivos y productos para luego calcular el cociente de reacción:

$$Q_c = \frac{\frac{0,3}{3} \cdot \frac{0,3}{3}}{\frac{0,6^2}{3}} = 0,25$$

Como $Q > K_c$ el sistema no se encuentra en equilibrio, y la reacción se desplazará hacia el lado de los reactivos.

Para calcular las composiciones en el equilibrio se construye un **cuadro de equilibrio**:

		\$2HI\$		\$H_2\$		\$I_2\$	
	-----		-----:		:-----:		-----:
	inicial		\$0.6\$		\$0.3\$		\$0.3\$
	cambio		\$2x\$		\$-x\$		\$-x\$
	equilibrio		\$0.6+2x\$		\$0.3-x\$		\$0.3-x\$

Sabiendo el valor de la constante de equilibrio, podemos reemplazar con los valores incógnita:

$$K_c = \frac{[H_2] \cdot [I_2]}{[HI]^2} = \frac{\frac{0.3-x}{3} \cdot \frac{0.3-x}{3}}{\left(\frac{0.6+2x}{3}\right)^2} = 0.022$$

Principio de Le Châtelier

Si un sistema en equilibrio se somete a una tensión o perturbación que cambie cualquiera de los factores determinantes del equilibrio, el sistema reaccionará para minimizar el efecto de la perturbación.

El principio de Le Châtelier permite predecir rápidamente la respuesta cualitativa de un sistema a los distintos cambios. La única forma de determinar con exactitud como responderá un equilibrio a las nuevas condiciones es usar los principios de la termodinámica.

Factores que afectan el equilibrio químico

Adición de reactivos y productos

Variación de volumen y presión de un a mezcla gaseosa

Variación de la temperatura

Catalizadores

Los catalizadores aumentan la velocidad directa e inversa de una reacción. Un catalizador no afecta la composición del equilibrio de una mezcla de reacción

Termodinámica y las constantes de equilibrio

Toda reacción química tiene tendencia espontánea hacia el equilibrio.

Para la reacción $\Delta G < 0$ a temperatura y presión constante, el modulo de la energía libre irá disminuyendo hasta que la reacción llega al equilibrio, donde el modulo de la energía libre tiene un valor nulo $\Delta G = 0$