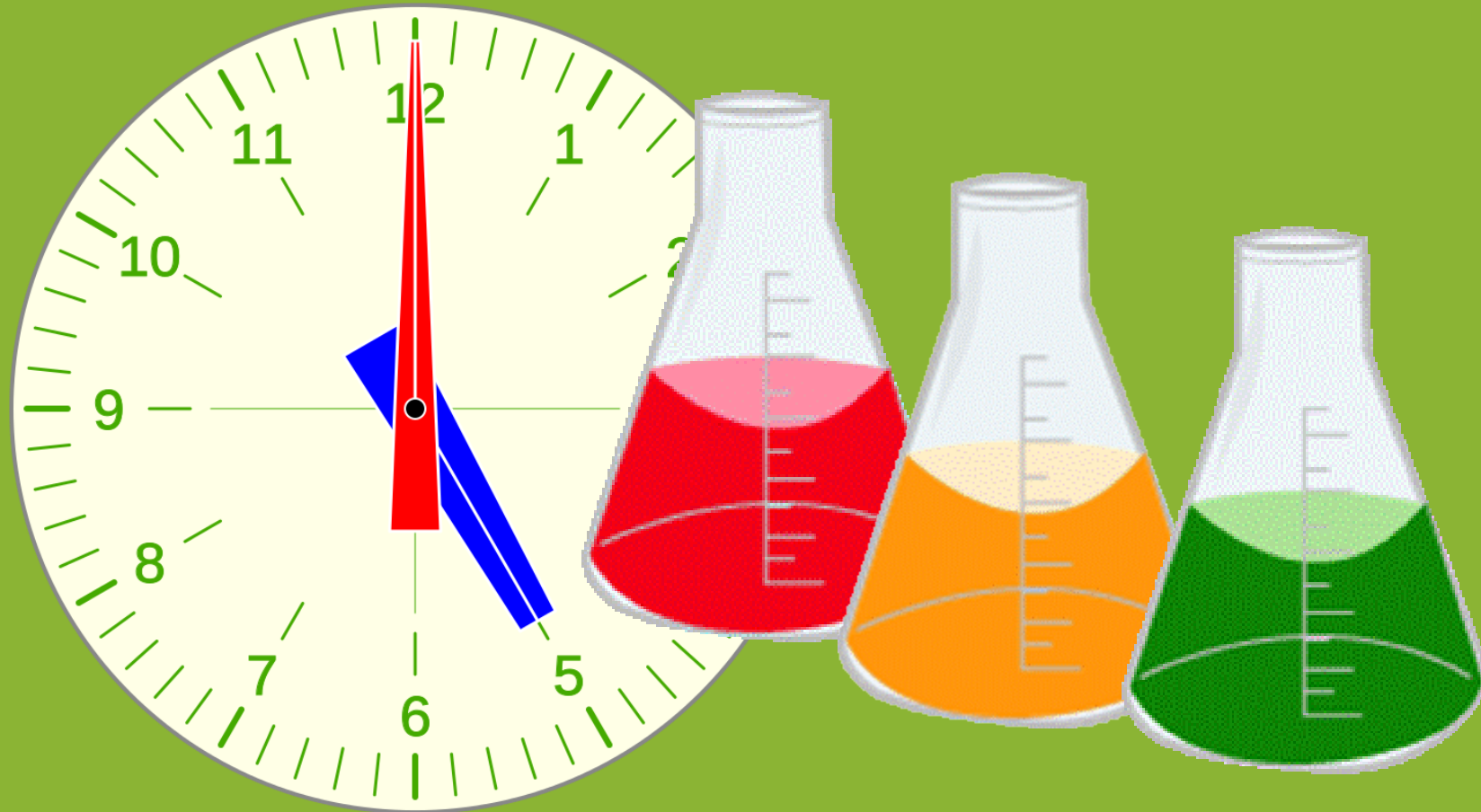


Enfoques del equilibrio químico

ELIZABETH DE LA TORRE FLOREANO
JULIO CÉSAR BOTELLO POZOS
MARINA LUCIA MORALES GALICIA

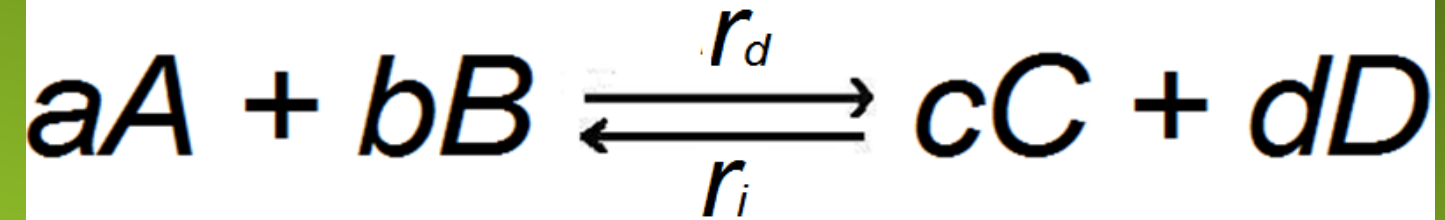


Analicemos primero el enfoque cinético...



De Dnu72 - Trabajo propio, CC BY-SA 4.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=41751502>

Consideremos la siguiente reacción:



la rapidez de reacción (r) se puede expresar como:

$$r_d = K_d [A]^a [B]^b$$

(rapidez de formación de productos)

$$r_i = K_i [C]^c [D]^d$$

(rapidez de formación de reactivos)

- Donde K_d es la constante de proporcionalidad cinética para la formación de productos y K_i es la constante de proporcionalidad cinética para la formación de reactivos; las cuales dependen de la temperatura.

Si tenemos una condición de equilibrio la rapidez de formación de productos es igual a la rapidez de formación de reactivos ($r_d = r_i$), entonces:

$$K_d [A]^a [B]^b = K_i [C]^c [D]^d$$

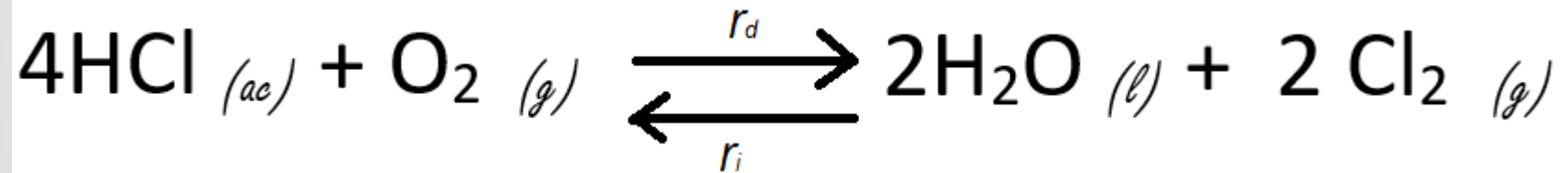
Despejando las constantes: $\frac{K_d}{K_i} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$

Donde $\frac{K_d}{K_i} = K_{eq}$

Por lo tanto:

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

En la reacción reversible



Transcurrido cierto tiempo, las concentraciones de los reactivos: HCl, O₂ y de los productos H₂O y Cl₂ *permanecen constantes*, esto quiere decir que la rapidez directa es igual a la rapidez inversa.

$$r_d = r_i$$

Entonces se ha logrado el equilibrio químico, es decir, cuando la rapidez de la reacción son iguales.

Analicemos ahora el enfoque termodinámico...



<https://pixabay.com/es/cubos-de-hielo-fuego-llama-quemar-1914351/>

Deducción de K_{eq} con base en ΔG

$$\Delta G = \Delta G^\circ + \ln \log \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Haciendo un cambio de base logarítmica, podemos expresar:

$$\Delta G = \Delta G^\circ + 2.303 RT \log \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

En condiciones de **equilibrio químico** se considera:

$$\Delta G = 0$$

Por lo tanto y despejando la Energía de Gibbs:

$$\Delta G^\circ = -2.303 RT \log \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Despejando el cociente de las concentraciones:

$$\frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = 10^{-\Delta G^\circ / 2.303 RT}$$

Keq

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

Por lo tanto...



<https://pixabay.com/es/maestro-experimentos-ciencia-2816112/>

Puede observarse que la K_{eq} es un parámetro que está en función de constantes, ya sea deduciéndolo termodinámicamente

También se puede apreciar que depende directamente de la temperatura

Lo anterior da origen a la Ley de acción de masas (1864), *También conocida como Ley de Guldberg y Waage*

Establece que para que una reacción química reversible en equilibrio a una temperatura constante, y una relación determinada de concentraciones de los productos (elevadas a sus coeficientes estequiométricos) entre las de los reactivos (elevadas a sus coeficientes estequiométricos) tiene un valor constante.

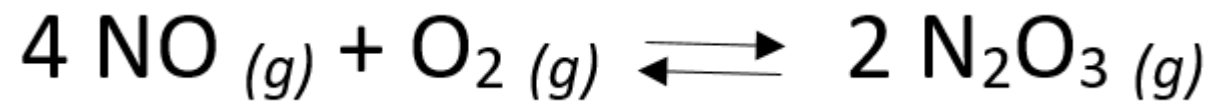
La ley fue enunciada por los científicos noruegos Cato Maximilian Guldberg y Peter Waage.



By Photogravure by H. Riffart, Berlin. Scanned, image processed and uploaded by Kuebi = Armin Kübelbeck - Zeitschrift für Physikalische Chemie, Band 8, von 1891, Public Domain, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=12025948>

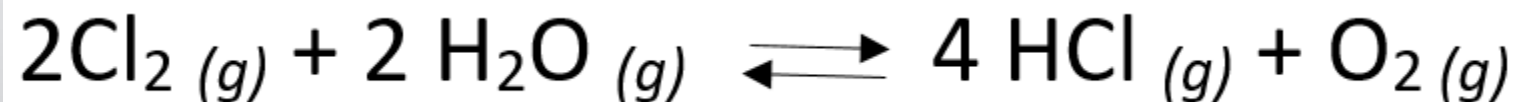
Con base a la Ley de Acción de Masas, podemos expresar la constante de equilibrio de la siguiente manera:

1



$$K_{eq} = \frac{[\text{N}_2\text{O}_3]^2}{[\text{NO}]^4 [\text{O}_2]}$$

2



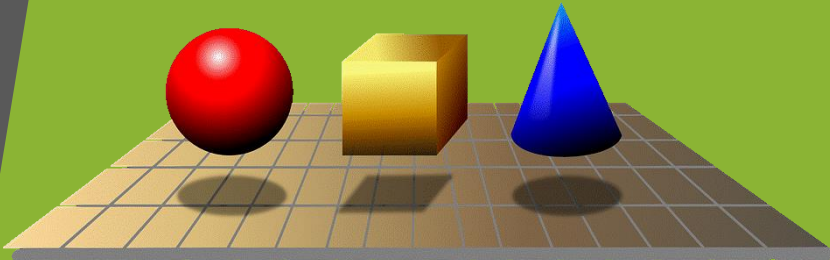
$$K_{eq} = \frac{[\text{HCl}]^4 [\text{O}_2]}{[\text{Cl}_2]^2 [\text{H}_2\text{O}]^2}$$

Entonces podemos definir lo siguiente:

- Si $K_{eq} \geq 1$ la mayoría de los reactivos se ha convertido en productos, es decir la reacción se ve favorecida o desplazada hacia los productos.
- Si $K_{eq} < 1$ se ve favorecida la reacción hacia la formación de los reactivos.

Analicemos ahora el enfoque macroscópico...

Volúmen



<https://pixabay.com/es/s%C3%B3lidos-figuras-geom%C3%A9tricas-153261/>

Masa



<https://pixabay.com/es/equilibrio-swing-igualdad-2108024/>

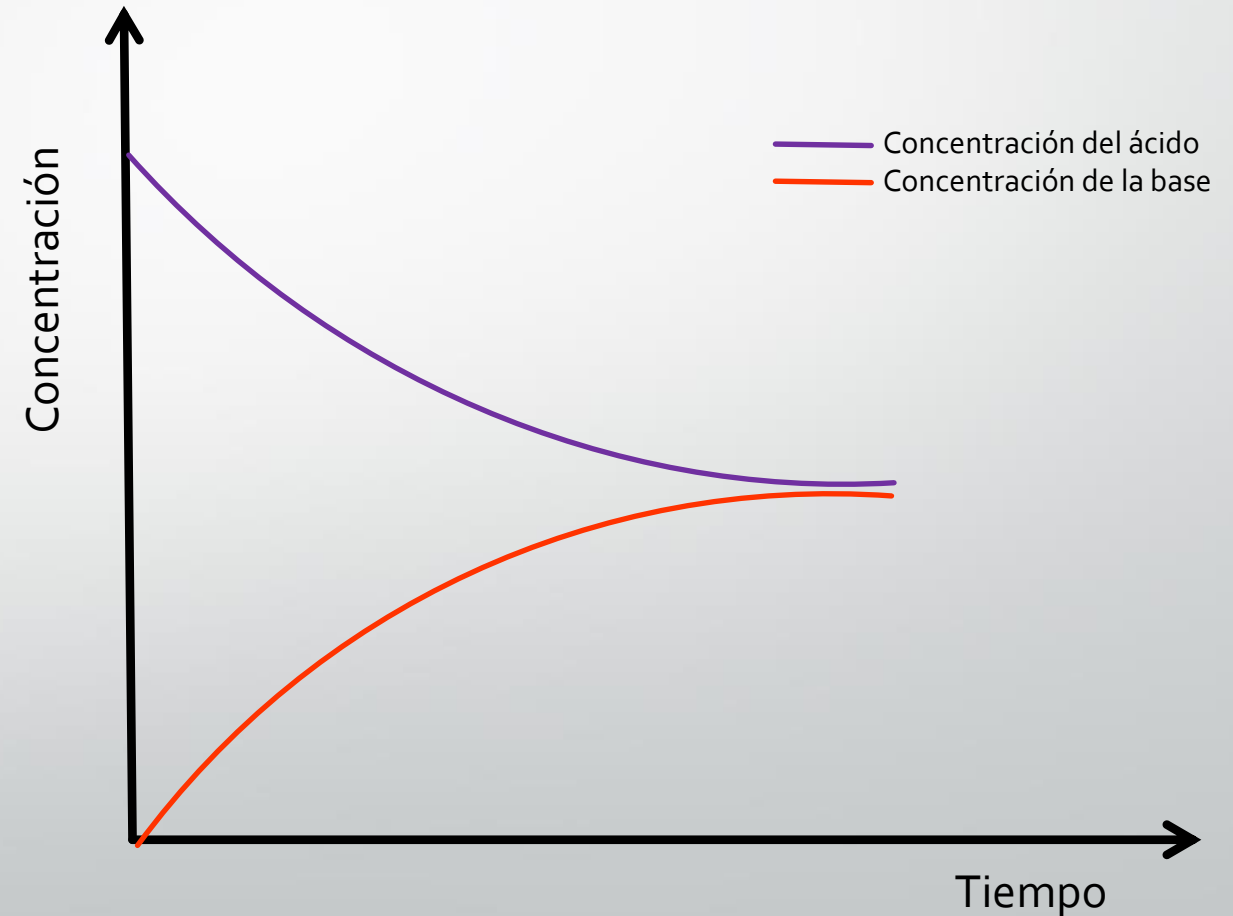
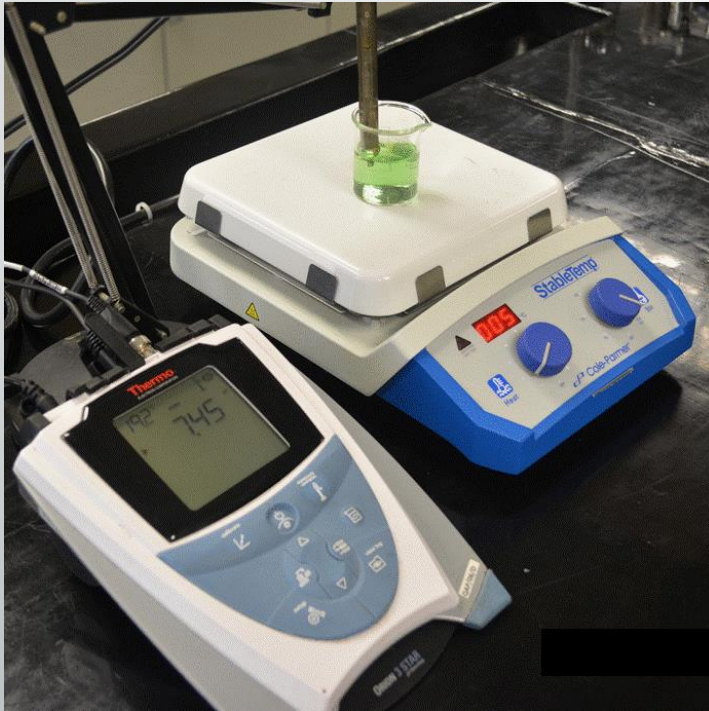
Concentración



Es cuando una propiedad extensiva de un sistema en equilibrio o bien la medición de la concentración de alguna(s) especie(s) permanece prácticamente constante.



Suponiendo que en una reacción de neutralización ácido base se tiene introducido el electrodo del potenciómetro en la solución del matraz para determinar el pH de la mezcla; se tendrá un punto en el que tal medida será constante, lo que indicará que la solución ha llegado al equilibrio.



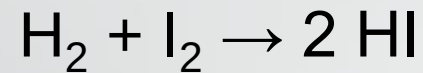
Revisemos algunos ejemplos...



<https://pixabay.com/es/qu%C3%ADmico-tubo-mujer-trabajo-hombre-1816371/>

Ejemplo 1 Expresar la Constante de equilibrio Keq

- Para la siguiente reacción:



Donde:

$$\text{A} = \text{H}_2 \quad a=1$$

$$\text{B} = \text{I}_2 \quad b=1$$

$$\text{C} = \text{HI} \quad c=2$$

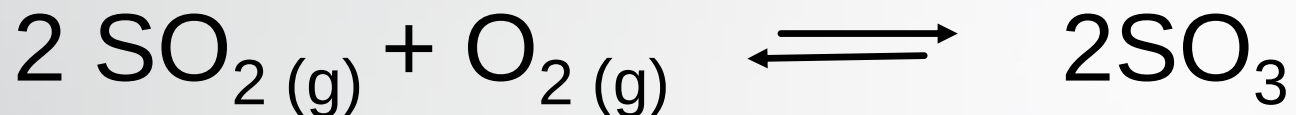
$$\text{D} = \text{no existe} \quad d = \text{no existe}$$

La Keq se expresa de la siguiente manera:

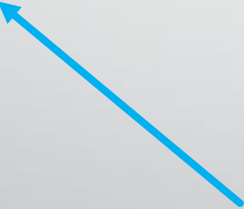
$$K_{eq} = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]}$$

Ejemplo 2 Calcular la Constante de equilibrio K_{eq} en términos de la concentración

A una temperatura de 1000°C , para la reacción:



La concentración de los reactivos SO_2 y O_2 presentes una vez alcanzado el equilibrio son respectivamente: 0.34 M , 0.17 M y de SO_3 es 0.06 M (a) escribir la Ley de Acción de Masas para éste equilibrio y (b) calcular el valor de la Constante de equilibrio a ésta temperatura:



La concentración de las soluciones deberán estar expresadas en Molaridad

Ejemplo 2 Calcular la Constante de equilibrio K_{eq} en términos de la concentración

a)

$$K_{eq} = \frac{[SO_3]^2}{[SO_2]^2 [O_2]}$$

b)

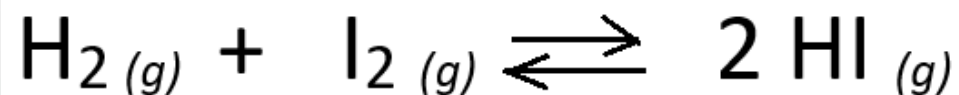
$$K_{eq} = \frac{[0.06]^2}{[0.34]^2 [0.17]} = 0.18$$

Los valores de la concentración son sustituidos sin unidades, ya que la constante de equilibrio es adimensional

El valor de $K_{eq} < 1$, por lo tanto la reacción se ve favorecida hacia la formación de reactivos.

Ejemplo 3 Cuando la constante de equilibrio es mayor a uno: $K_{eq} \geq 1$

Se mezclan pequeñas cantidades de Hidrógeno e Yodo a 229°C en un recipiente de 1.0 L. Al establecerse el equilibrio están presentes las siguientes concentraciones $[HI] = 0.490 \text{ M}$, $[H_2] = 0.080 \text{ M}$ y $[I_2] = 0.080 \text{ M}$. ¿Cuál será el valor de la constante de equilibrio?



$$K_{eq} = \frac{[0.490]^2}{[0.080][0.080]} = 37.5$$

El valor de $K_{eq} \geq 1$, por lo tanto la reacción se ve favorecida hacia la formación de productos.

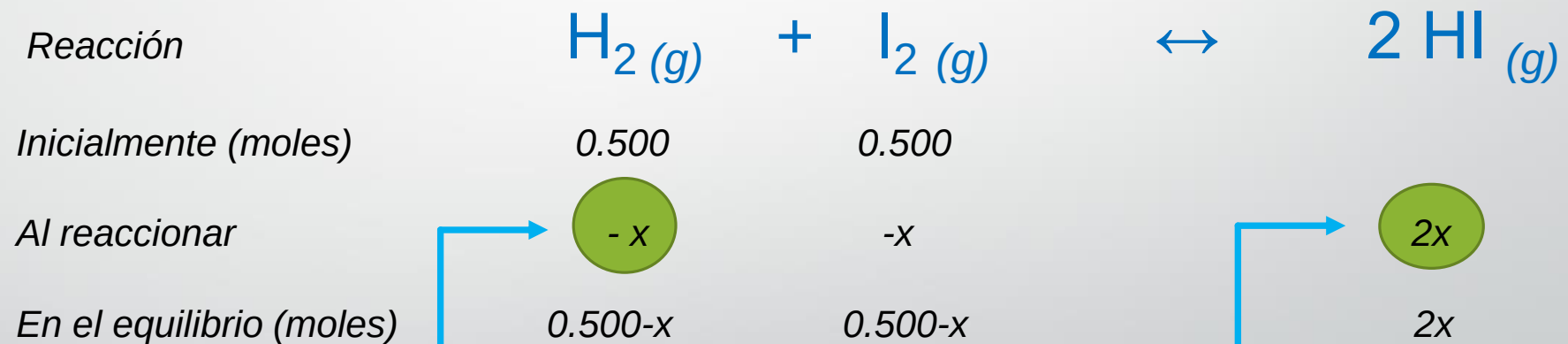
Ejemplo 4 Calcular la concentración a partir de la K_{eq}

Se coloca una mezcla de 0.0500 moles de H_2 y 0.0500 moles de I_2 en un recipiente de acero inoxidable de 1.0 litros de capacidad a $430^\circ C$. Calcula las concentraciones de H_2 , I_2 y de HI en el equilibrio. *La K_{eq} para ésta reacción a dicha temperatura es de 54.3.*

Planteamiento, parte 1

Datos:

0.500 moles de H_2
 0.500 moles de I_2
 1.0 L
 $K_{eq}=54.3$
 $T^\circ = 430^\circ C$

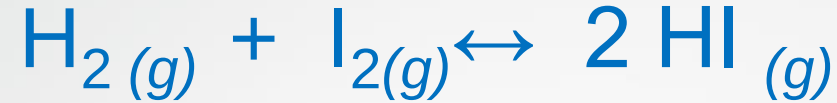


Se expresa como "x" por que es una cantidad que desconocemos y es negativa por que indica que se consume.

2 Corresponde al coeficiente y es positivo por que es una cantidad que se produce.

Planteamiento, parte 2

Reacción



El problema es calcular la concentración en el equilibrio de cada una de las especies; recordando que ésta se expresa en Molaridad $M=\text{mol/L}$

Por lo tanto:

$$[\text{H}_2] = \frac{0.500 - x}{1} = 0.500 - x$$

$$[\text{I}_2] = \frac{0.500 - x}{1} = 0.500 - x$$

$$[\text{HI}] = \frac{2x}{1} = 2x$$

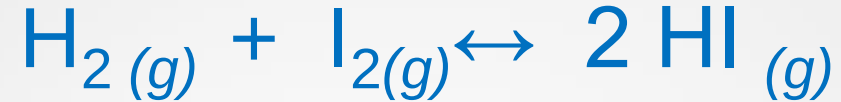
Para encontrar el valor real, se sustituyen éstos valores en la fórmula de la K_{eq} :

$$K_{eq} = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]}$$

$$54.3 = \frac{[2x]^2}{[0.500 - x][0.500 - x]} = \frac{[2x]^2}{[0.500 - x]^2}$$

Planteamiento, parte 3

Reacción



$$54.3 = \frac{[2x]^2}{[0.500 - x][0.500 - x]} = \frac{[2x]^2}{[0.500 - x]^2}$$

Como ambos extremos de la fracción están elevados al cuadrado, podemos expresar:

$$54.3 = \left[\frac{2x}{0.500 - x} \right]^2$$

Para despejar y eliminar el cuadrado al lado derecho de la ecuación, se utiliza la raíz cuadrada:

$$\sqrt{54.3} = \frac{2x}{0.500 - x}$$

El denominador pasa al lado izquierdo multiplicando al resultado de la raíz:

$$7.37(0.500 - x) = 2x$$

Planteamiento, parte 4

$$7.37(0.500 - x) = 2x$$

$$3.685 - 7.37x = 2x$$

$$3.685 = 2x + 7.37x$$

$$3.685 = 9.37x$$

$$x = \frac{3.685}{9.37} = 0.393$$

$$x = 0.393$$

Ya que se encontró el valor de x se sustituye en cada expresión de la concentración para cada una de las especies:

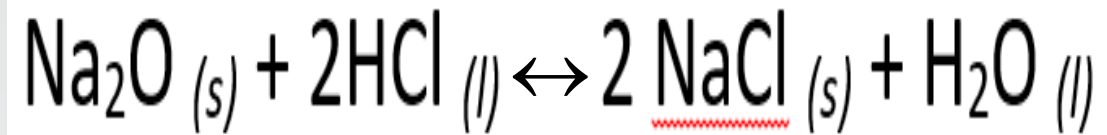
$$[H_2] = 0.500\text{ M} - 0.393\text{ M} = 0.107\text{ M}$$

$$[I_2] = 0.500\text{ M} - 0.393\text{ M} = 0.107\text{ M}$$

$$[HI] = 2(0.393\text{ M}) = 0.786\text{ M}$$

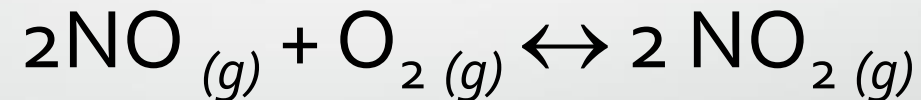
Ejercicios de Práctica

1. Expresa la constante de equilibrio para la siguiente reacción química:



$$\frac{[\text{H}_2\text{O}][\text{NaCl}]^2}{[\text{Na}_2\text{O}][\text{HCl}]^2} = K_{eq}$$

2. ¿Cuál es el valor de la constante de equilibrio para la siguiente reacción en equilibrio?



Si se encontró que a 400°C las concentraciones de los gases son:

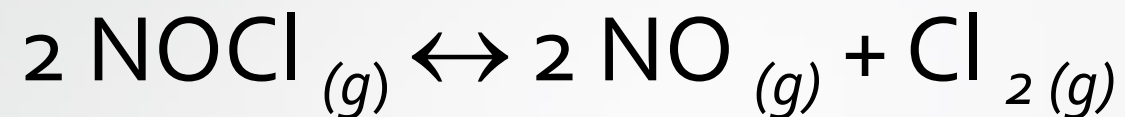
$$[\text{NO}] = 0.890 \text{ M}$$

$$[\text{O}_2] = 0.250 \text{ M}$$

$$[\text{NO}_2] = 0.032 \text{ M}$$

$$K_{eq} = 0.0051$$

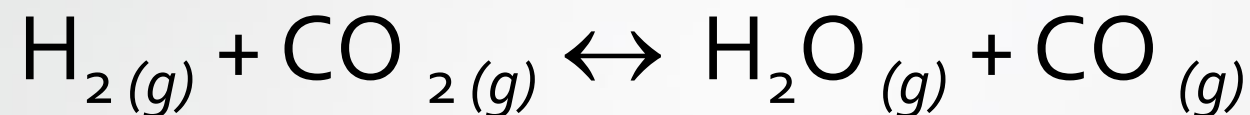
3. Se ha estudiado la reacción del equilibrio siguiente:



A 735°K , que da como resultado una $K_{eq} = 0.083 \text{ M}$; Indique la dirección a la cual se desplaza el equilibrio.

R. La reacción se ve favorecida hacia los reactivos.

4. Se sabe que a 750 °C, el valor de K es 0.771 para la siguiente reacción:



Si colocamos 0.0100 moles de H₂ y 0.0150 moles de CO₂ en un recipiente de 2 L a 750 °C, podemos calcular las concentraciones de cada una de las especies en el equilibrio.

$$\begin{aligned} R. [\text{H}_2] &= 0.0022 \text{ M} \\ [\text{CO}_2] &= 0.0047 \text{ M} \\ [\text{H}_2\text{O}] &= 0.0028 \text{ M} \end{aligned}$$