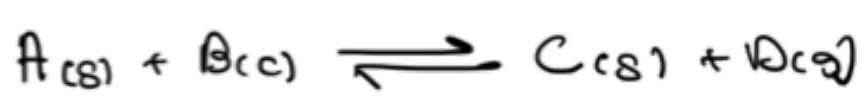


Equilibrio Químico.

Termodinámicamente hablando, el equilibrio en una reacción química se alcanza cuando $\Delta G = 0$.

Si variamos P, T, V , el equilibrio siempre tenderá a restablecerse según lo establecido en el principio de Le Chatelier.



Todos los reacciones vienen definidos por una constante que relaciona las productos a los reactivos. Estas constantes pueden venir dados en función de las concentraciones: K_c

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

o en función de las presiones, K_p :

$$K_p = \frac{P_C^c \cdot P_D^d}{P_A^a \cdot P_B^b} \quad \text{donde } P_i (\text{presión parcial}) = X_i \cdot P_T$$

$\downarrow$
 fracción molar
 $X_i = \frac{n_i}{n_T} !!$

la relación entre K_p y K_c la sacamos a partir de la ecuación de los gases ideales: $P \cdot V = nRT$:

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

$R = 0.082 \frac{L \cdot at}{K \cdot mol}$
 $T = ^\circ C + 273$
 $\Delta n = n(\text{productos}) - n(\text{reactivos})$

En el caso de no tener variación de número de moles entre productos y reactivos:

$$K_p = K_c$$

Este tipo de problemas se resuelven siguiendo todos la misma mecánica. Solo hay variaciones en caso de:

- datos de dos reactivos (seuñamos de R_1)
- que nos den datos de productos $\Rightarrow$ tenemos lo que se forma
- nos den o nos piden el grado de disociación (α)

Ejemplo:

Una científica está en el laboratorio realizando un experimento en condiciones de seguridad adecuadas en el que tiene inicialmente 5g de pentacloruro de fósforo.

- ¿Qué equilibrio químico de descomposición tiene lugar?
- ¿Qué cantidad de pentacloruro se disocia?
- ¿Cuánto cloro gas obtenemos en CN de $P_0 T$?
- las constantes de equilibrio K_p y K_c , ¿son iguales? Calcula K_p y K_c en esas condiciones sabiendo que el volumen es de 8'5 L.

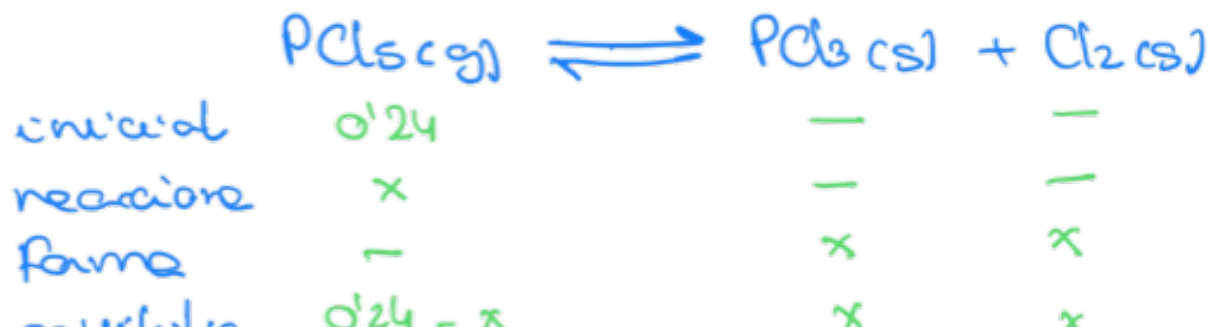
Condiciones de trabajo en el laboratorio: $T = 22.5^\circ C$ y $P = 1at$.

Datos: $M_m(POCl_5) = 208.223 \text{ g/mol}$

$$m = 5g POCl_5 \times \frac{1 \text{ mol } POCl_5}{208.223 \text{ g } POCl_5} = 0.02401 \text{ mol } POCl_5$$

$$T = 22.5 + 273 = 295.5 K$$

$$P = 1at$$



$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

$$\hookrightarrow n = \frac{P \cdot V}{R \cdot T} = \frac{1 \cdot 8.5}{0.082 \cdot 295.5} = 0.3507 \text{ mol totales}$$

$$n_T = 0.024 - x + x + x = 0.024 + x = 0.3507$$

$$x = 0.3507 - 0.02401 = 0.1106 \text{ mol reacción}$$

a) Reacción de equilibrio químico



b) Se disocia 0.1106 moles de $POCl_5$

$$0.1106 \text{ mol } POCl_5 \times \frac{208.223 \text{ g } POCl_5}{1 \text{ mol } POCl_5} = 23.029 \text{ g } POCl_5 \text{ se disocian}$$

c) Para calcular el Cl_2 que obtenemos en CN de $P_0 T$, como

$$x = n(Cl_2) = 0.1106 \text{ mol } Cl_2$$

$$0.1106 \text{ mol } Cl_2 \times \frac{22.4 \text{ L } Cl_2}{1 \text{ mol } Cl_2} = 2.47 \text{ L } Cl_2 \text{ obtenemos}$$

d) Para calcular las constantes de equilibrio vamos a calcular las concentraciones de equilibrio:

$$[POCl_5]_{eq} = \frac{0.024 - x}{8.5} = \frac{0.024 - 0.1106}{8.5} = \frac{0.1295}{8.5} = 0.01523 \text{ mol/L}$$

$$[POCl_3]_{eq} = [Cl_2]_{eq} = \frac{x}{8.5} = \frac{0.1106}{8.5} = 0.0130 \text{ mol/L}$$

$$K_c = \frac{[POCl_3][Cl_2]}{[POCl_5]} = \frac{(0.0130)^2}{0.01523} = 0.11$$

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n} = 0.11 \cdot (0.082 \cdot 295.5)^1 = 0.2693$$

$$\Delta n = 2 - 1 = 1 \text{ mol}$$

K_p y K_c no son iguales ya que $\Delta n \neq 0$.

En este problema podríamos variar las condiciones del equilibrio, pero este va a intentar restablecerse.

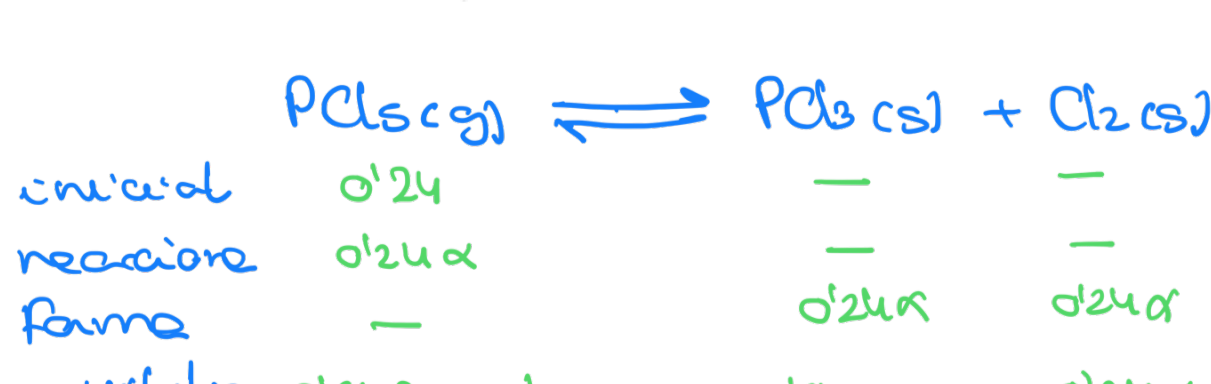
Por ejemplo, si aumentamos la concentración de los reactivos, el equilibrio siguiendo el principio de Le Chatelier debería desplazarse en el sentido donde aumenten los productos, es decir, hacia la derecha. $\rightarrow$

Si nos pidiere el grado de disociación tenemos dos opciones:

$\rightarrow$ hacerlo a partir de los moles disociados.

$$\alpha = \frac{x}{n_i} = \frac{0.1106}{0.2401} = 0.46 \Rightarrow 46\%$$

$\rightarrow$ plantearlo el equilibrio con grado de disociación:



$$n_T = 0.024 - 0.024\alpha + 0.024\alpha + 0.024\alpha = 0.024(1 + \alpha)$$

$$0.3507 = 0.024(1 + \alpha)$$

$$\frac{0.3507 - 0.02401}{0.02401} = \alpha = 0.4606$$

$$\alpha = 0.4606 = 46.06\%$$