

Estequiometría

¿Cuánto se produce?
¿Cuánto reacciona?

Termoquímica

¿Desprende o absorbe calor?
¿Cuánto calor?

Espontaneidad

¿Por qué se produce?
¿En qué dirección?

Equilibrio

¿Cuándo se alcanza?
¿Cómo modificarlo?

Cinética

¿Cómo de rápido va?
¿Cómo acelerarla?

Reacciones químicas

Tipos

Eq. de fases

Disoluciones

Equilibrios ácido-base

Equilibrios de solubilidad

Equilibrios redox

Mecánico

Térmico

Equilibrios

Material

Equilibrio químico

Equilibrio de fases

- Gases
- Sólidos/líquidos
- En disolución

<https://www.youtube.com/watch?v=GyzfKnjuGjU>



ASPECTOS BÁSICOS DEL EQUILIBRIO QUÍMICO

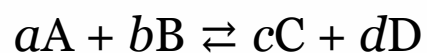
Estado de equilibrio: estado en que la composición del sistema permanece fija.

1.1. Perspectiva cualitativa

- Equilibrio dinámico.
- Los sistemas evolucionan espontáneamente hacia un estado de equilibrio.
- Las propiedades del estado de equilibrio son las mismas, independientemente de la dirección desde la que se alcanza.

1.2. Perspectiva cuantitativa

Ley de acción de masas



Equilibrio Químico

¿Qué es un equilibrio químico?

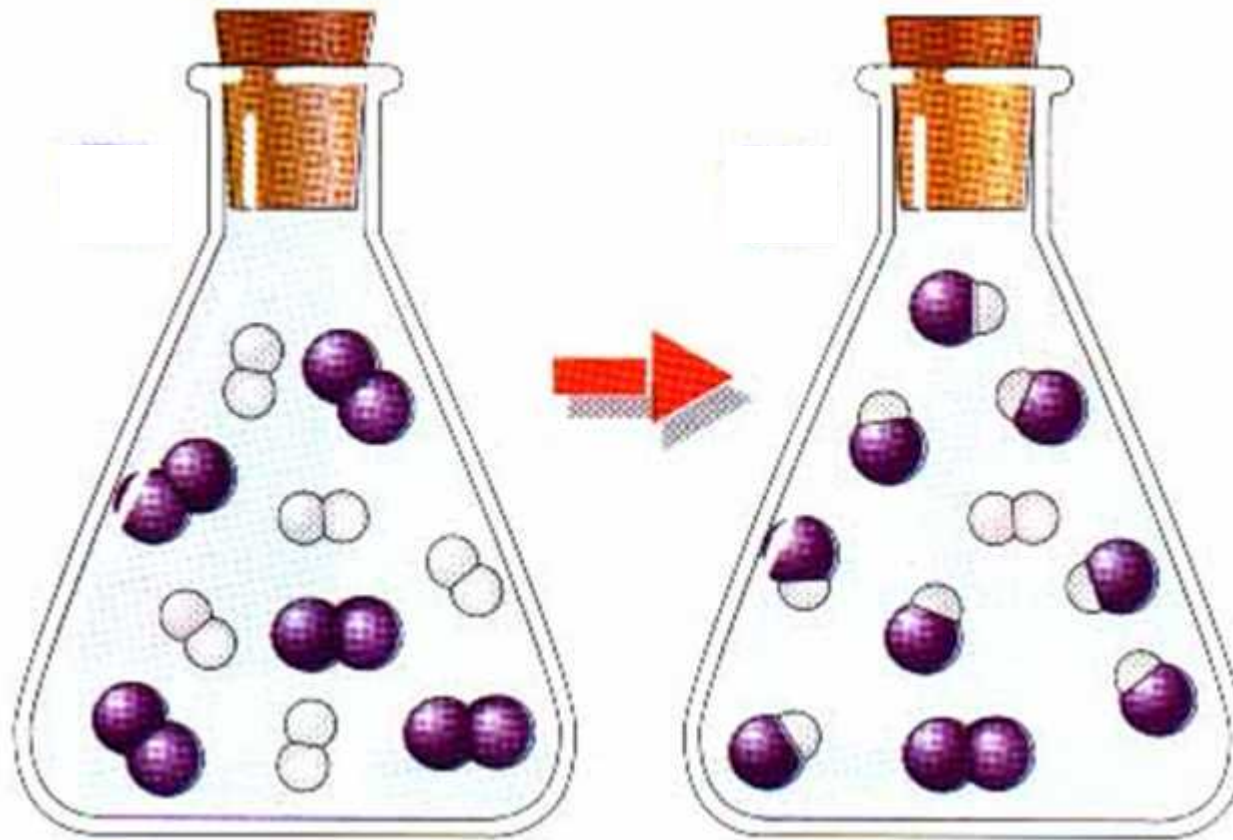
- Es una reacción que nunca llega a completarse, pues se produce en ambos sentidos (los reactivos forman productos, y a su vez, éstos forman de nuevo reactivos).
- Cuando las concentraciones de cada una de las sustancias que intervienen (reactivos o productos) se estabiliza se llega al **EQUILIBRIO QUÍMICO**

El equilibrio químico es un estado en el que no se observan cambios durante el tiempo transcurrido



Equilibrio de moléculas

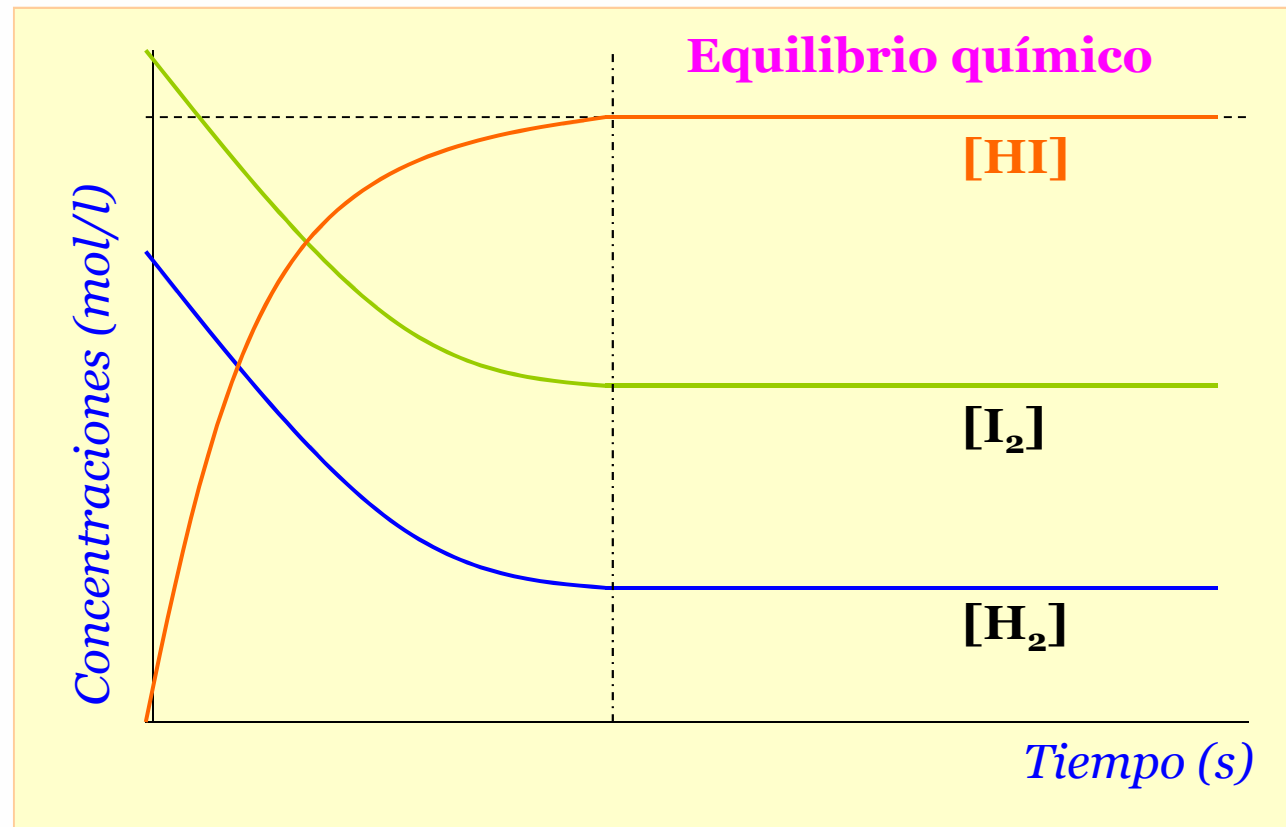
($\text{H}_2 + \text{I}_2 \rightleftharpoons 2 \text{HI}$)

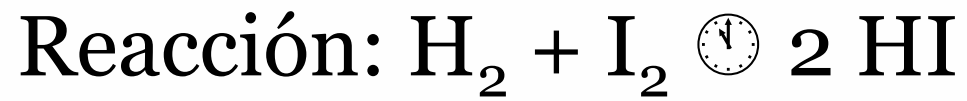


<https://www.youtube.com/watch?v=XokyjsCIOxM>

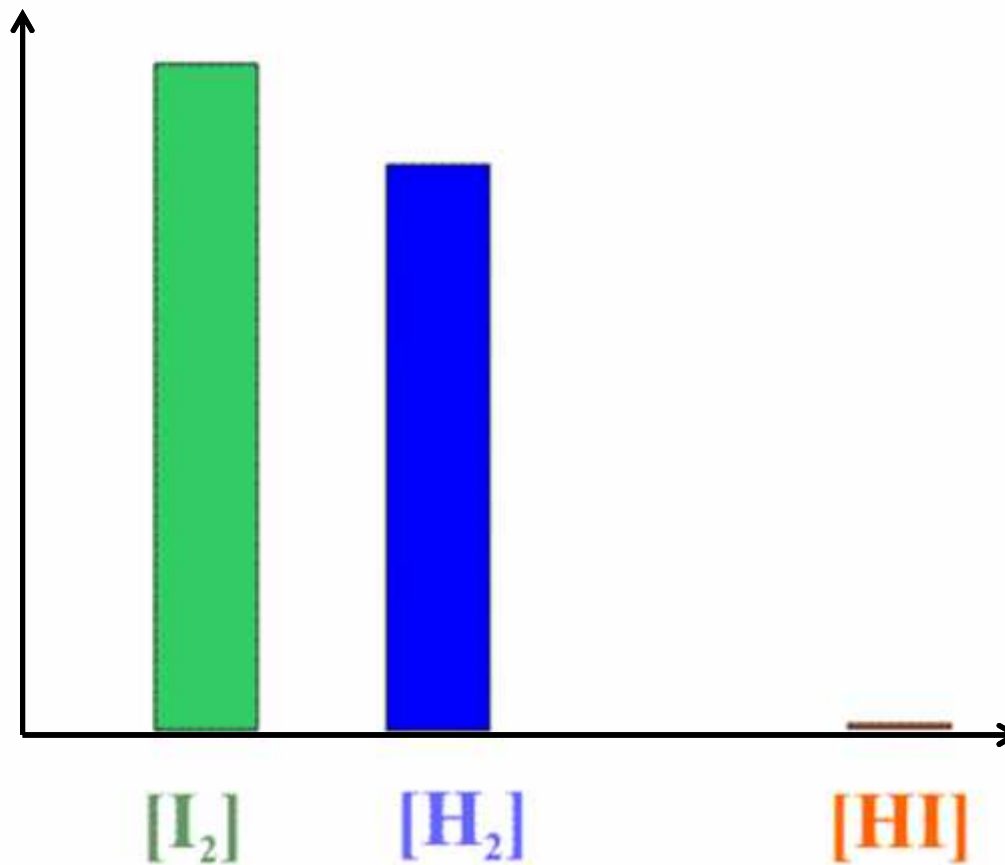


Variación de la concentración con el tiempo ($\text{H}_2 + \text{I}_2 \rightleftharpoons 2 \text{HI}$)





Variación de las
concentraciones con el tiempo

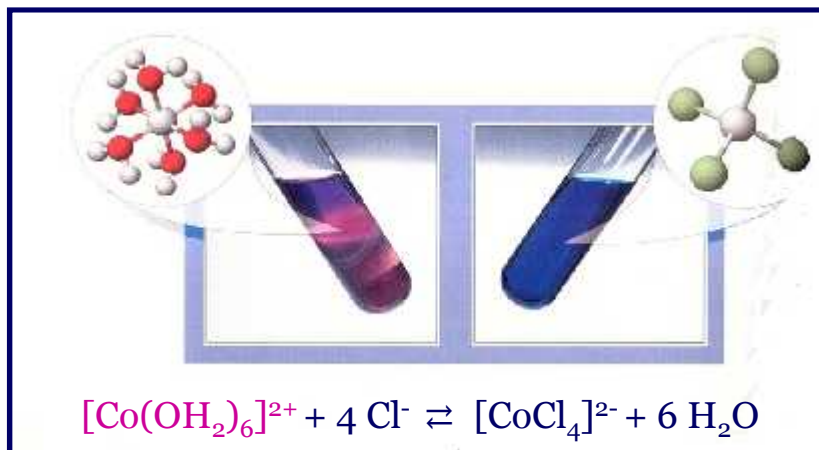


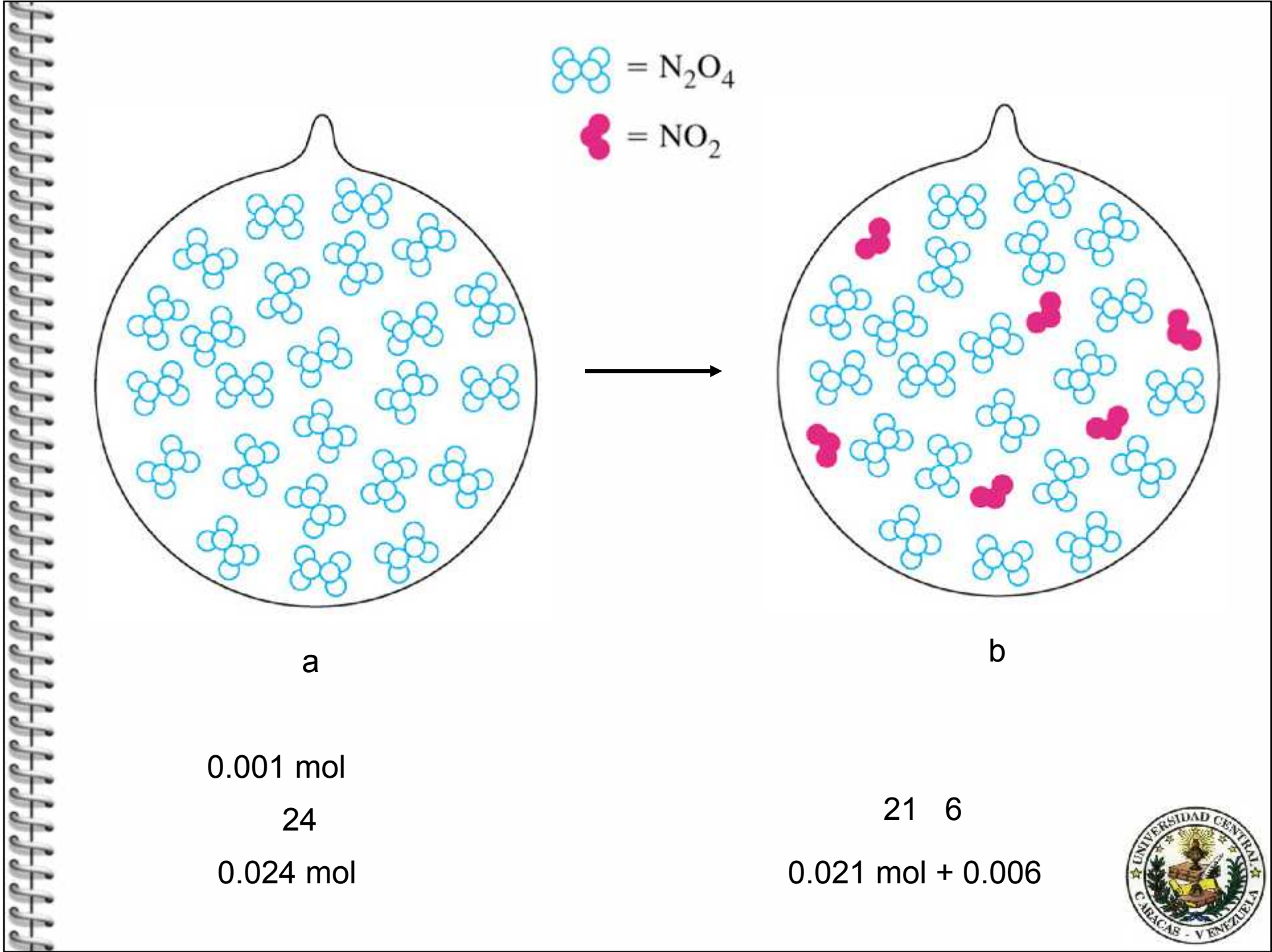
www.cepaxarquia.org



Características del Equilibrio Químico

- Propio de reacciones reversibles.
- La velocidad de reacción directa se iguala a la velocidad de reacción inversa.
- Las concentraciones de cada especie NO cambian en el tiempo.
- El avance de la reacción, está controlado por una Constante de Equilibrio.
- Depende de la temperatura.
- Todos los sistemas químicos reversibles alcanzan en el tiempo la condición de equilibrio
- El estado de equilibrio químico es de naturaleza *dinámica* y no estática.





Cuando una reacción química alcanza el estado de equilibrio, las concentraciones de reactivos y productos permanecen constantes en el tiempo, sin que se produzcan cambios visibles en el sistema.

En el equilibrio químico participan distintas sustancias como productos y reactivos

El equilibrio entre dos fases de la misma sustancia se denomina **equilibrio físico** debido a que los cambios que ocurren son procesos físicos.



equilibrio heterogéneo se aplica a las reacciones en las que alguna de las especies reaccionantes se encuentra en una fase diferente.



equilibrio homogéneo se aplica a las reacciones en que todas las especies reaccionantes se encuentran en la misma fase



Velocidad de reacción

La **velocidad de reacción** es una magnitud positiva que expresa cómo cambia la concentración de un reactivo o producto con el tiempo.



Sentido directo: $V_d = k_d[A]^n[B]^m$

Sentido reverso: $V_r = k_r[AB_2]^z$



La velocidad de reacción es directamente proporcional a la concentración de los reactivos elevada a los ordenes de reacción.

V: velocidad de reacción

k: constante de velocidad específica

n y m: ordenes de la reacción respecto a cada reactante

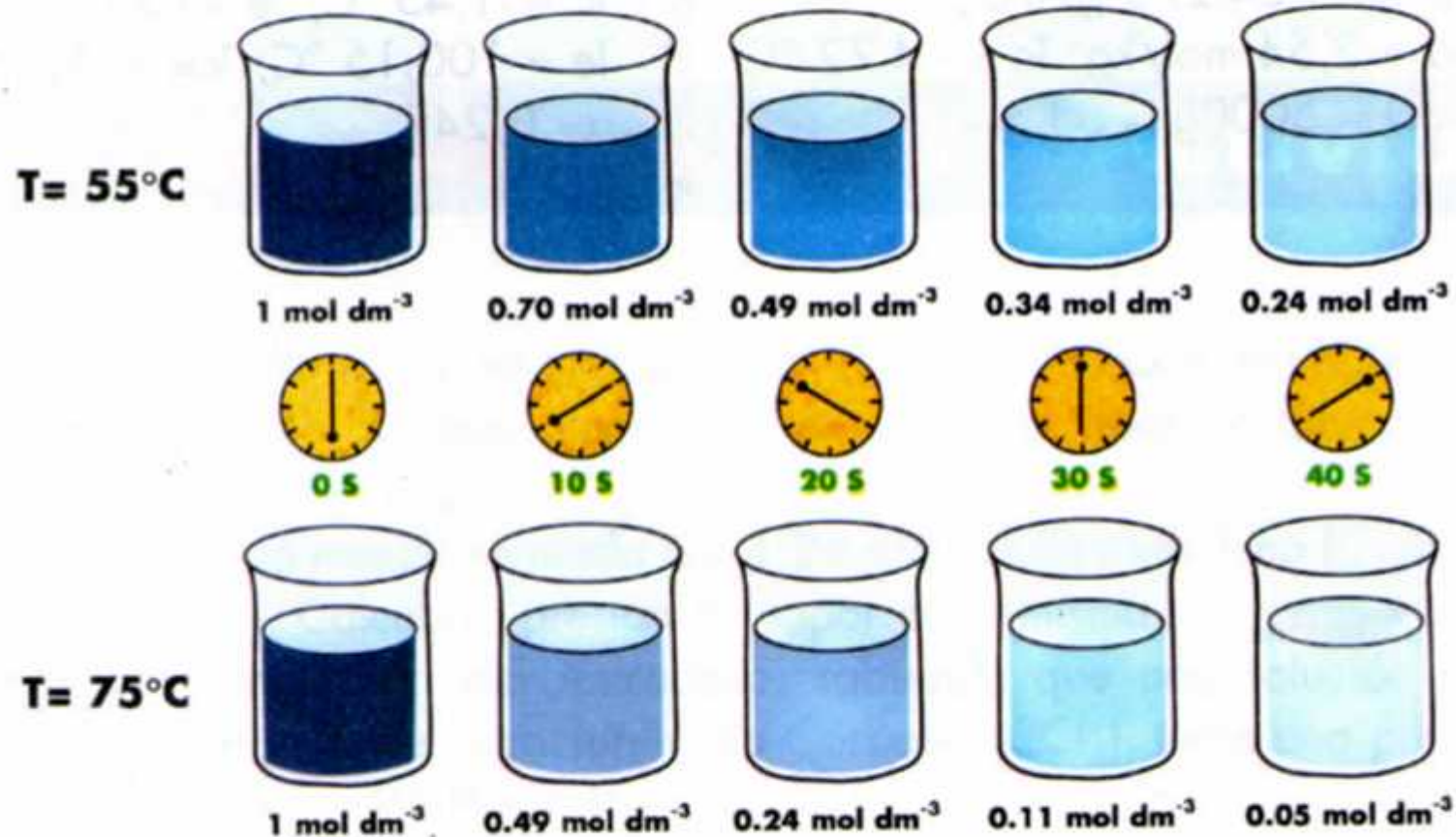
z: orden de la reacción respecto al producto

[]: representa la concentración molar de cierta especie química



Ejemplo

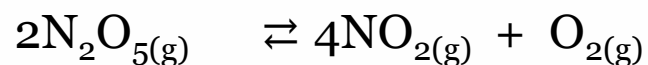
Consideremos los 10 primeros segundos de la descomposición de un colorante a dos temperaturas, 75 y 55 °C



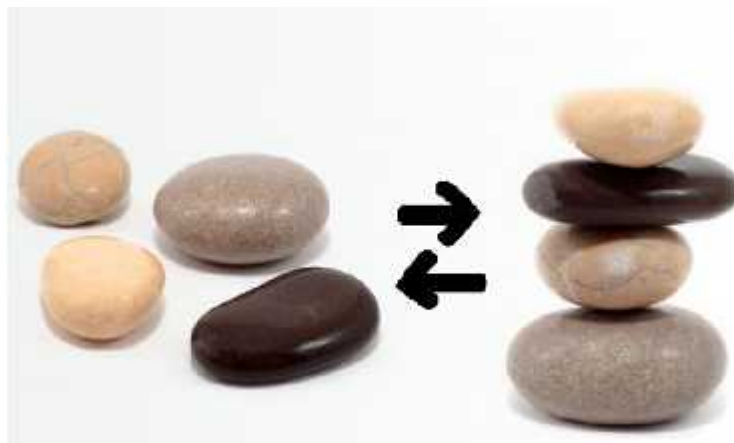
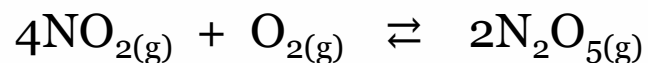
A medida que transcurre la reacción, la solución se hace más clara, debido a la disminución de la concentración del colorante. A 55 °C procede de forma más lenta

Ejemplo en fase gaseosa

- Cuando se coloca en un recipiente de volumen conocido a temperatura constante una muestra de $\text{N}_2\text{O}_{5(g)}$, éste se descompone:



- Cuando la concentración de los productos aumenta, los mismos se convierten en reactantes:

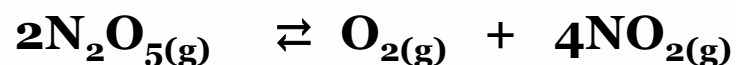


quimicamask.blogspot.com



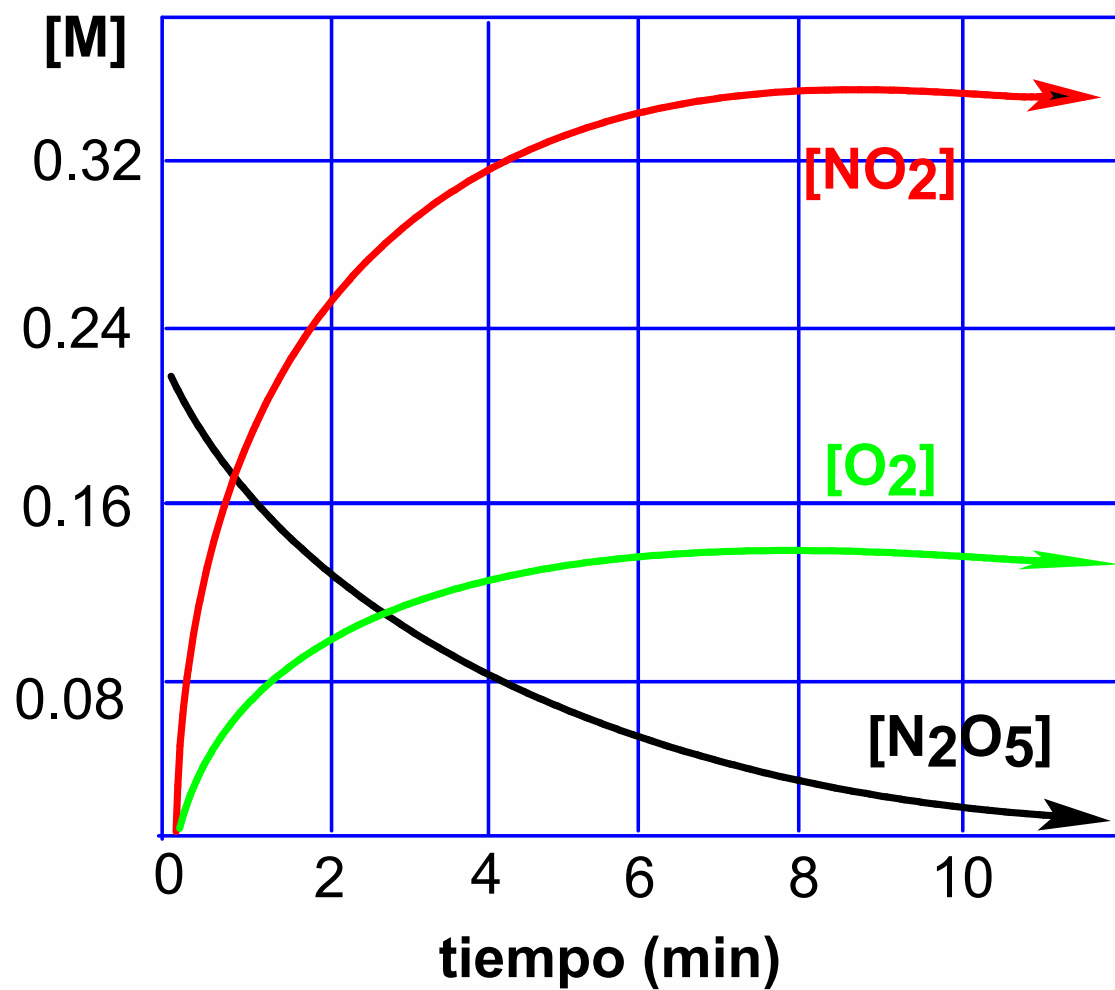
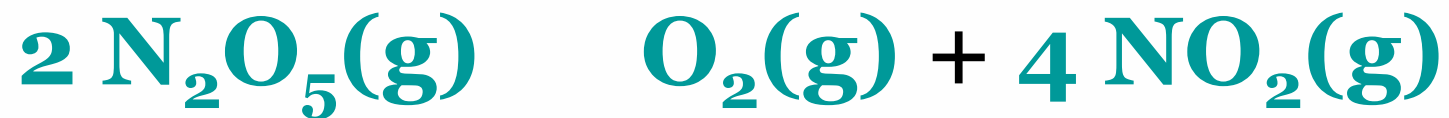
Reacciones Reversibles

- Finalmente, las dos reacciones evolucionan de modo tal que sus *velocidades* se igualan, estableciéndose un *equilibrio químico*.
- Bajo estas condiciones la reacción es *reversible* y se representa de la siguiente manera:



- En una reacción reversible, la reacción ocurre simultáneamente en ambas direcciones.
- Lo anterior se indica por medio de una doble flecha
- En principio, casi todas las reacciones son reversibles en cierta medida.





Peter Waage (28 de junio de 1833, Flekkefjord – 13 de enero de 1900, Oslo) fue un químico noruego y profesor de la Universidad de Oslo. Junto a su amigo, el también químico y matemático Cato Guldberg, Waage descubrió y desarrolló la ley de acción de masas entre los años 1864 y 1879.



C. M. Guldberg. Waage



La constante de equilibrio



Ley de acción de masas:

La velocidad de una reacción reversible es proporcional a una constante de Velocidad específica multiplicada por la concentración molar de cada especie elevada a su respectivo coeficiente estequiométrico

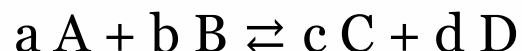
...en la condición de equilibrio

- La velocidad de reacción permanece constante.
- La velocidad de reacción directa se iguala a la velocidad de reacción reversa.
- Los **ordenes de reacción** de cada especie se aproximan a los **coeficientes estequiométricos** que presentan en la ecuación.
- El cociente entre las constantes de velocidad, k_d/k_r , se transforma en una nueva constante, conocida como **Constante de Equilibrio, K_{eq}** .

La constante de equilibrio



En una reacción cualquiera:



la constante K_c tomará el valor:

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

para concentraciones en el equilibrio

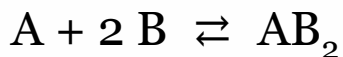
La constante K_c cambia con la temperatura

¡ATENCIÓN!: Sólo se incluyen las especies gaseosas y/o en disolución. Las especies en estado sólido o líquido tienen concentración constante y por tanto, se integran en la constante de equilibrio.

Desde el punto de vista cinético

El equilibrio químico es un proceso dinámico. A nivel molecular existe una gran actividad debido a que las moléculas de reactivos siguen produciendo moléculas de productos, y estas a su vez siguen formando moléculas de reactivos

La constante de equilibrio



$$v_d = k_d [A][B]^2$$

$$v_r = k_r [AB_2]$$

$$V_d = V_r$$

$$k_d [A][B]^2 = k_r [AB_2]$$



$$K_c = \frac{k_d}{k_r} = \frac{[AB_2]}{[A][B]^2}$$



Sobre la velocidad de reacción...

La Teoría de las colisiones

Esta teoría supone que para producirse un proceso químico es necesario que las sustancias reaccionantes se encuentren en forma libre y choquen en forma efectiva, para permitir la interacción química necesaria para la transformación. Es decir, la velocidad de una reacción es directamente proporcional al número de choques por segundo entre las partículas de los reaccionantes y a la efectividad de ese número de choques.

Colisión Entre Moléculas

(a) Colisión Eficaz



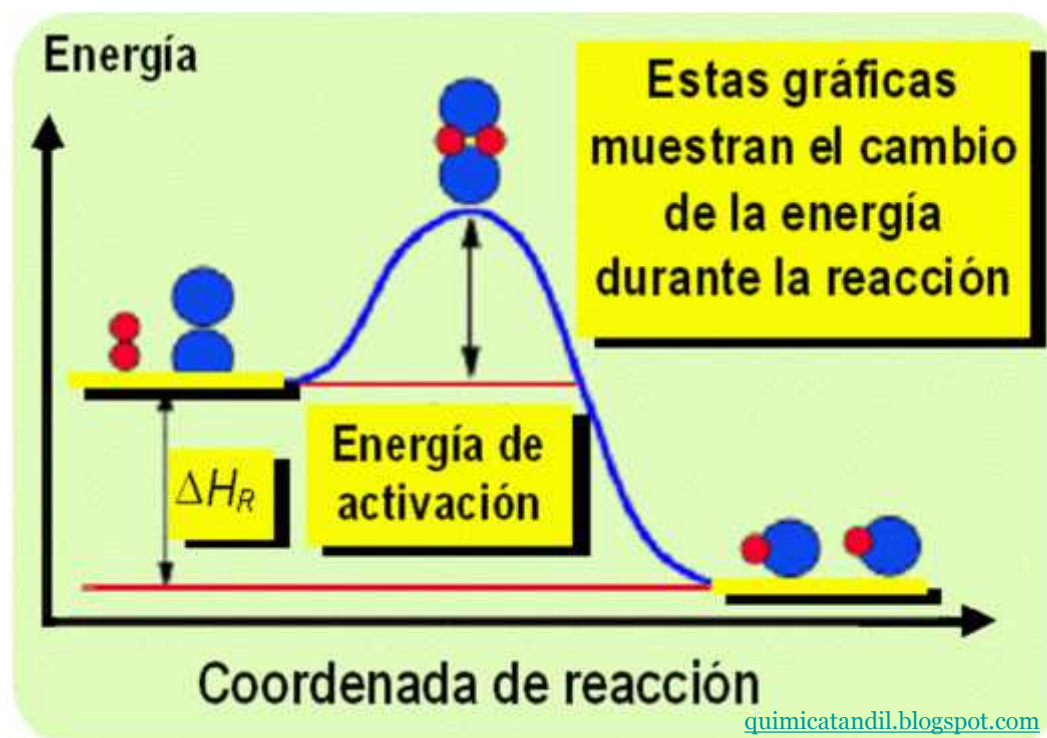
(b) Colisión Ineficaz



Energía de activación

La energía de activación es la cantidad mínima de energía necesaria para la ruptura o formación de un enlace químico, y es características de cada proceso particular.

Esa energía es una energía adicional para que un choque sea efectivo.



Criterios para representar la K_{eq}

Los líquidos y los **sólidos** puros no se incluyen en la constante de equilibrio.

Si una ecuación se **invierte**, el valor de la nueva K_{eq} , será el inverso del valor anterior.

El valor de la K_{eq} de toda ecuación que se amplifique por un número, cambiará a la **potencia** del número por el cual se amplificó.

Si una reacción se realiza en etapas sucesivas, la K_{eq} de la reacción global corresponde a la multiplicación de las K_{eq} de todas las etapas.

Ejemplo



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



Respuesta del equilibrio a un cambio de condiciones

¿Cómo podemos modificar la situación de equilibrio?

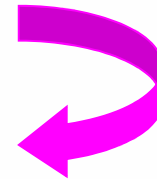
Cambiando la constante de equilibrio

Cambiando la temperatura



Sin cambiar la constante de equilibrio

Cambiando el resto de condiciones



Principio de Le Châtelier

Henry Louis Le Châtelier

Nace en París, Francia, el 8 de octubre de 1859. Muere en Miribel-les-Échelles, Francia, el 17 de septiembre de 1936). Fue un famoso químico francés. Es conocido por su Principio de los Equilibrios Químicos, mejor conocido como Principio de Le Châtelier



Principio de Le Châtelier

“Si un sistema químico que está en equilibrio se somete a una perturbación que cambie cualquiera de las variables que determina el estado de equilibrio, el sistema evolucionará para contrarrestar el efecto de la perturbación”.



Efecto del cambio de temperatura a presión constante

- Si $\Delta H^{\circ} > 0$ (endotérmica): $T \rightarrow$ se desplazará a la derecha
- Si $\Delta H^{\circ} < 0$ (exotérmica): $T \rightarrow$ se desplazará a la izquierda

Se observa que, al aumentar T el sistema se desplaza hacia donde se consume calor, es decir, hacia la izquierda en las reacciones exotérmicas y hacia la derecha en las endotérmicas.

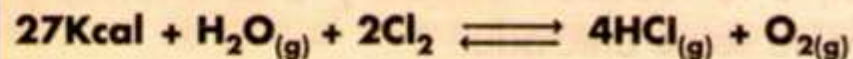
Si disminuye T el sistema se desplaza hacia donde se desprenda calor (derecha en las exotérmicas e izquierda en las endotérmicas).





Con el aumento de temperatura, el sistema busca el equilibrio, consumiendo parte de esa energía en la separación de moléculas de HI, produciendo $\text{H}_{2(g)}$ y $\text{I}_{2(g)}$.

El equilibrio se desplaza hacia la izquierda.



Al aumentar la energía del sistema, el restablecimiento se logrará consumiendo parte de esa energía en la combinación del Cloro (Cl_2) y el agua, produciendo HCl y O_2 .

El equilibrio se desplaza hacia la derecha.

Un aumento de temperatura favorece el proceso endotérmico.

Un cambio en la temperatura del sistema produce una alteración en la constante de equilibrio; si es un aumento, se verá favorecido aquel proceso que absorba calor; es decir, el proceso endotérmico. En el caso de que sea una disminución de temperatura se verá favorecido el proceso exotérmico.





(a)



Aumenta T



(b)

¿Hacia dónde se desplazará el equilibrio al aumentar la temperatura, en la siguiente reacción?



Al aumentar la temperatura ($T \uparrow$) el equilibrio también se desplaza hacia la derecha (\rightarrow) donde se consume calor por ser la reacción endotérmica



Efecto de la concentración de uno de los reactivos o productos

Si una vez establecido un equilibrio se varía la concentración algún reactivo o producto el equilibrio desaparece y se tiende hacia un nuevo equilibrio.

Las concentraciones iniciales de este nuevo equilibrio son las del equilibrio anterior con las variaciones que se hayan introducido.

Lógicamente, la constante del nuevo equilibrio es la misma, por lo que si aumenta [reactivos], $Q \downarrow$ y la manera de volver a igualarse a K_c sería que [reactivos] \downarrow (en cantidades estequiométricas) y, en consecuencia, que [productos] \uparrow .





Ejemplo

$\text{PCl}_5(\text{g}) \rightleftharpoons \text{PCl}_3(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g})$ ya sabemos que partiendo de 2 moles de $\text{PCl}_5(\text{g})$ en un volumen de 5 litros, el equilibrio se conseguía con 1,45 moles de PCl_5 , 0,55 moles de PCl_3 y 0,55 moles de Cl_2 ¿cuántos moles habrá en el nuevo equilibrio si una vez alcanzado el primero añadimos 1 mol de Cl_2 al matraz? ($K_c = 0,042$)

Equilibrio:	$\text{PCl}_5(\text{g})$	$\text{PCl}_3(\text{g}) +$	$\text{Cl}_2(\text{g})$
Moles inic.:	1,45	0,55	1,55
Moles equil.	$1,45 + x$	$0,55 - x$	$1,55 - x$
	$1,45 + x$	$0,55 - x$	$1,55 - x$
conc. eq(mol/l)	-----	-----	-----
	5	5	5

$$K_c = \frac{\frac{0,55 - x}{5} \cdot \frac{1,55 - x}{5}}{\frac{1,45 + x}{5}} = 0,042$$

Resolviendo: $x = 0,268$

Grado de disociación (α)

Se utiliza en aquellas reacciones en las que existe un único reactivo que se disocia en dos o más

Es la fracción de un mol que se disocia (tanto por 1)

En consecuencia, el % de sustancia disociada es igual a $100 \cdot \alpha$



Efecto del cambio en la presión o en el volumen

En cualquier equilibrio en el que haya un cambio en el número de moles entre reactivos y productos como por ejemplo:



(en el caso de una disociación es un aumento del número de moles) $K_c \cong c \cdot \alpha^2$

Al aumentar “p” (o disminuir el volumen) aumenta la concentración y eso lleva consigo una menor “ α ”, es decir, el equilibrio se desplaza hacia la izquierda que es donde menos moles hay.

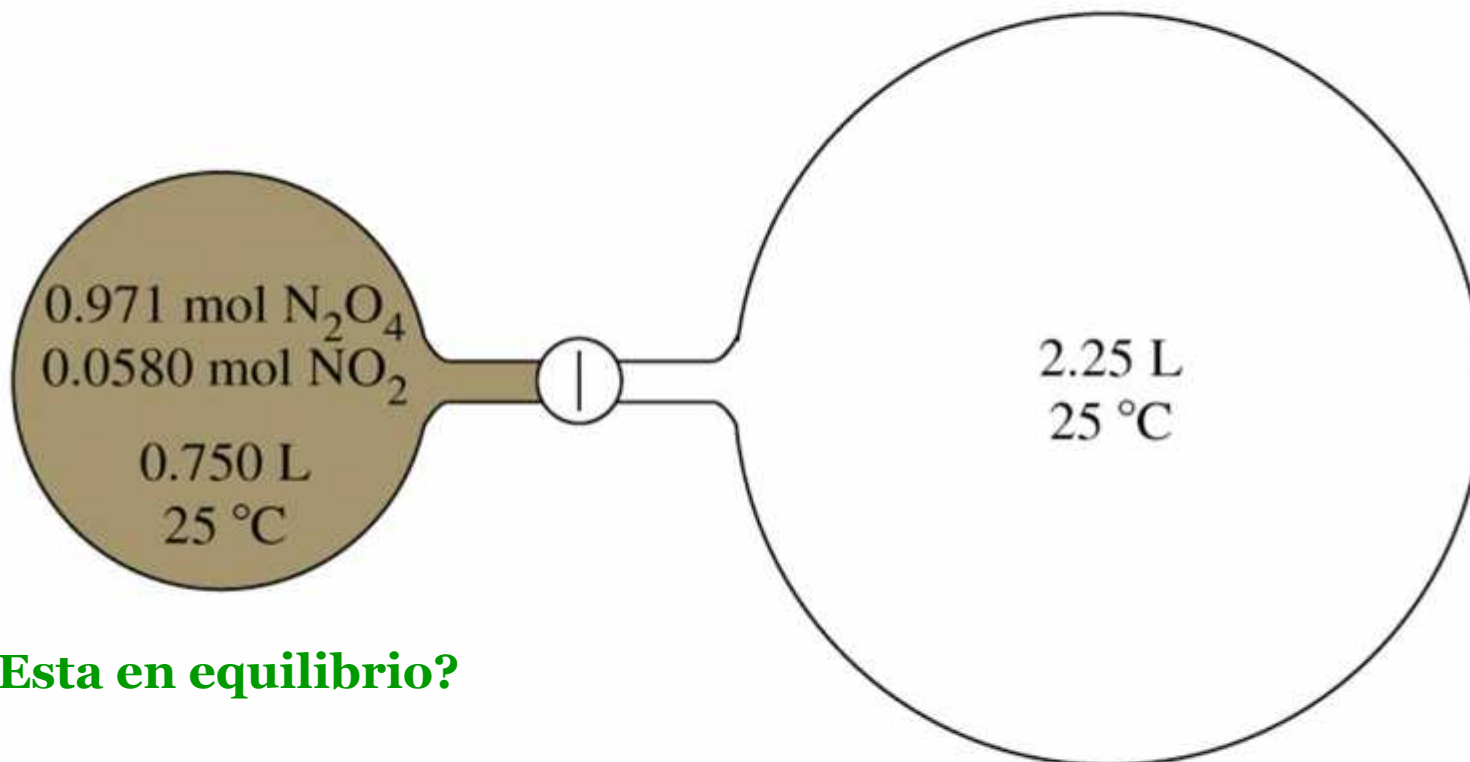


Este desplazamiento del equilibrio hacia donde menos moles haya al aumentar la presión es válido y generalizable para cualquier equilibrio en el que intervengan gases .

Lógicamente, si la presión disminuye, el efecto es el contrario.

Si el número de moles total de reactivos es igual al de productos ($a+b = c+d$) se pueden eliminar todos los volúmenes en la expresión de K_c , con lo que éste no afecta al equilibrio (y por tanto, tampoco la presión).

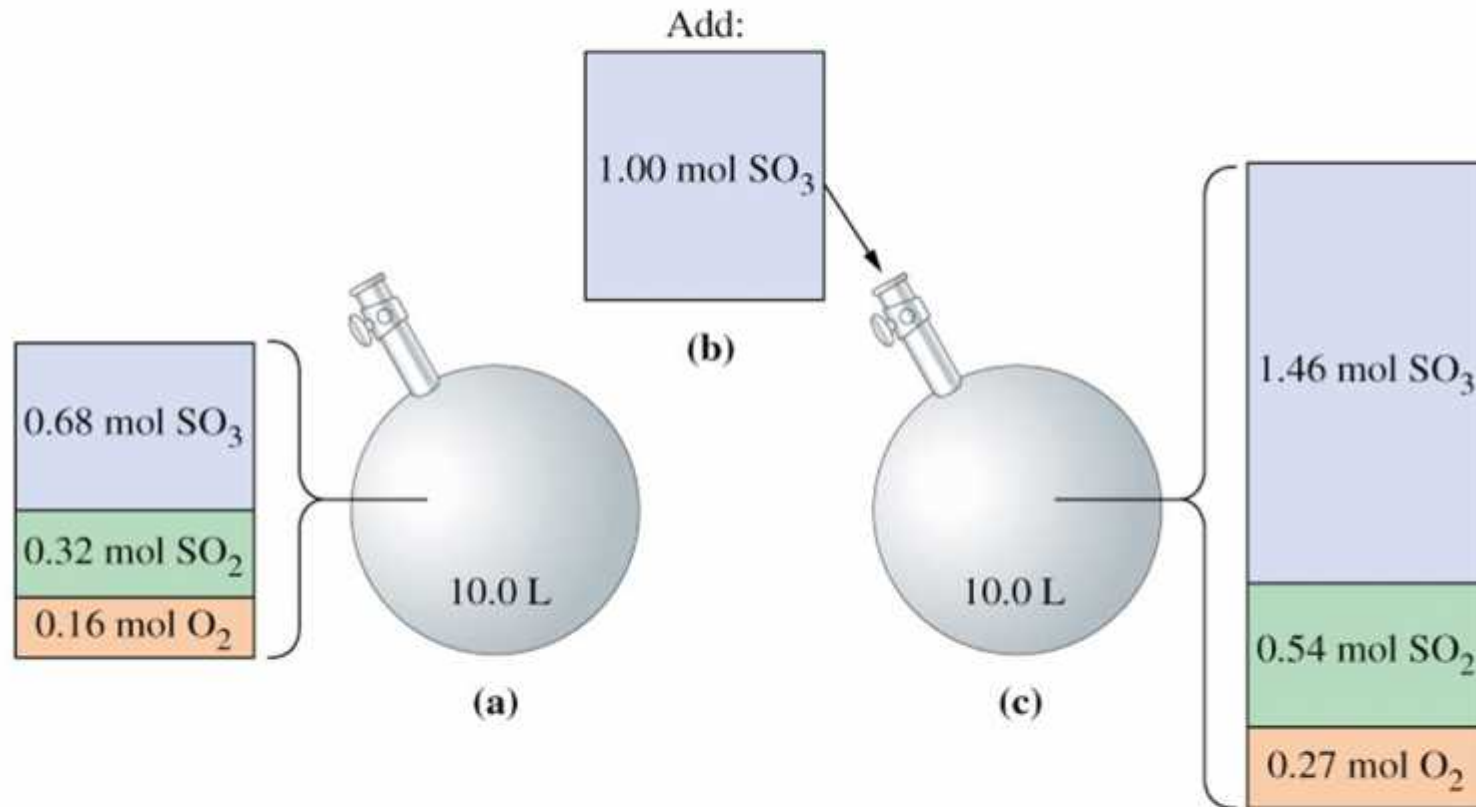


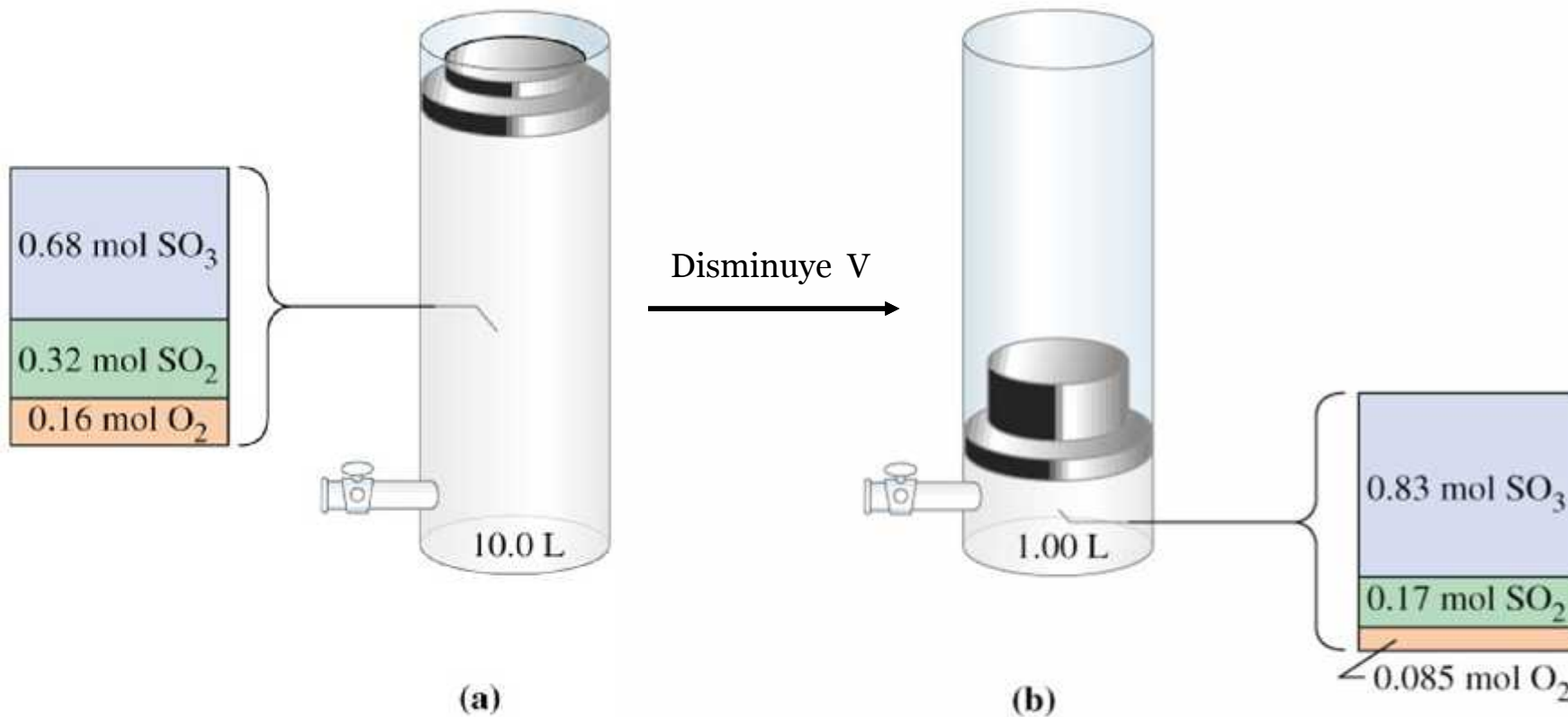


¿Esta en equilibrio?

¿qué pasa cuando se abre la llave de conexión?







Variaciones en el equilibrio

- $\Delta [\text{reactivos}] > 0$ \longrightarrow
- $\Delta [\text{reactivos}] < 0$ \longleftarrow
- $\Delta [\text{productos}] > 0$ \longleftarrow
- $\Delta [\text{productos}] < 0$ \longrightarrow
- $\Delta T > 0$ (exotérmicas) \longleftarrow
- $\Delta T > 0$ (endotérmicas) \longrightarrow
- $\Delta T < 0$ (exotérmicas) \longrightarrow
- $\Delta T < 0$ (endotérmicas) \longleftarrow
- $\Delta p > 0$ Hacia donde menos n^0 moles de gases
- $\Delta p < 0$ Hacia donde más n^0 moles de gases

MUY
IMPORTANTE

MUY
IMPORTANTE



Variación
en el
equilibrio