# Ley de acción de masas. Constante de equilibrio, KC

Supongamos la siguiente reacción química elemental, su reacción inversa y sus respectivas ecuaciones de velocidad:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Supongamos que al principio de la reacción solo se tiene A y B. En este momento la velocidad de la reacción es máxima ya que las concentraciones de A y B serán máximas, sin embargo, esa velocidad irá disminuyendo. Tan pronto como aparezcan las primeras moléculas de los productos C y D se dará la reacción inversa aunque a menor velocidad, sin embargo, esta velocidad irá aumentando. Llegará un momento en el que ambas velocidades se igualen. En ese momento la reacción habrá alcanzdo el quilibrio:

A continuación podemos pasar a un lado las constantes de velocidad y al otro lado las concentraciones:

Al término Kdirecta/Kinversa, lo llamamos KC y por lo tanto queda definido de la siguiente manera:

En la expresión anterior, solo se tienen en cuenta aquellos reactivos o productos cuya concentración varíe, los sólidos o los líquidos no se incluyen porque su concentración no varía, sin embargo, los sólidos en disolución si pueden varíar y por lo tanto, estos sí se incluyen en la ecuación de la constante KC.

# Propiedades de las constantes de equilibrio

## KC de una reacción inversa

Si se tiene una reacción:

La reacción inversa tiene constante de equilibrio inversa:

## KC de una combinación de 2 reacciones

Si se tienen las reacciones:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Se pide calcular la KC’ de la ecuación combinación de las anteriores: 2·ec1+3·ec2

# Cociente de reacción

El cociente de reacción se calcula igual que la constante de equilibrio en instantes cualesquiera diferentes de los de equilibrio:

## Predicción del sentido de la reacción

La comparación entre KC y QC va a determinar el sentido de la reacción de acuerdo a la siguiente tabla.

|  |  |
| --- | --- |
| QC<KC | Sentido directo |
| QC=KC | Equilibrio |
| QC>KC | Sentido inverso |

# Procedimiento de resolución de problemas

Todos los problemas tienen una metodología similar. Hay 2 maneras de trabajar los equilibrios: con concentraciones o con moles. A continuación se van a ver ambas con unos ejemplos.

## Procedimiento de resolución de problemas con concentraciones

*Dada la reacción genérica: N2O4🡪2NO2*

*La concentración inicial de N2O4 es 5,10 M y de NO2, 0,20 M. Una vez alcanzado el equilibrio la concentración de NO2 es 0,50 M.*

1. Determinar KC
2. Determinar QC al principio de la reacción
3. Determinar KC
4. Realizar una tabla donde representemos o bien los moles o bien las concentraciones. En este caso, como el enunciado da las concentraciones se hará una tabla con concentraciones.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | N2O4 | 🡪 | 2NO2 |
| Inicio | 5,10 |  | 0,20 |
| Reacción (1) | -x |  | +2·x |
| Equilibrio (2) | 5,10-x |  | 0,20+2·x |

(1) En la reacción no se sabe cuanto va a reaccionar, por eso se pone x multiplicado por el coeficiente estequiométrico de cada sustancia. Los reactivos como desaparecen están negativas y los productos positivos.

(2) En este paso se suma la concentración inicial y las concentraciones de reacción.

1. Dado que el enunciado nos dice que la concentración en el equilibrio de NO2 es 0,50 M.
2. Ahora que se conoce el valor de x podría reescribirse la tabla sustituyendo la x.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | N2O4 | 🡪 | 2NO2 |
| Inicio | 5,10 |  | 0,20 |
| Reacción (1) | -0,15 |  | +2·0,15 |
| Equilibrio (2) | 4,95 |  | 0,50 |

1. En este paso ya se podría calcular KC con los valores de equilibrio de la tabla.

1. Determinar QC al principio de la reacción.

QC es el mismo cálculo que KC pero para cualquier instante de la reacción, mientras que KC es solo para el estado de equilibrio.

Como se ve QC<KC, por tanto a el sentido de la reacción es hacia la derecha.

## Procedimiento de resolución de problemas con moles

El siguiente ejemplo está extraído del ejercicio 2 del examen de mayo de 2012:

*Sea el sistema en equilibrio: N2 (g) +O2 (g) ↔ 2NO (g) que contiene 0,0240 moles de N2 y 0,0631 moles de O2 y 0,00115 moles de NO en un recipiente de 1 litro a 2200 K. Calcular KC y QC al comienzo de la reacción.*

1. Realizar una tabla donde representemos o bien los moles o bien las concentraciones. En este caso, como el enunciado da los moles y el volumen, podría hacer la tabla con los moles o dividirlos entre los litros totales y con ellos trabajar con concentraciones como en el ejemplo anterior. Se va a trabajar en este caso con moles.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | N2 | O2 | 🡪 | 2NO |
| Inicio | No se especifica | No se especifica |  | No se especifica |
| Reacción (1) | -x | -x |  | +2x |
| Equilibrio (2) | 0,0240 | 0,0631 |  | 0,00115 |

(1) En la reacción no se sabe cuánto va a reaccionar, por eso se pone x multiplicado por el coeficiente estequiométrico de cada sustancia. Los reactivos como desaparecen están en negativo y los productos positivos.

(2) A diferencia del ejemplo anterior ahora se conocen todas las concentraciones de equilibrio por lo que no habrá que calcular x.

1. En este caso, el cálculo de KC ya sale directamente. Únicamente como paso previo hay que darse cuenta de que la fórmula de KC lleva concentraciones no moles, por lo que habría que calcularlas dividiendo entre el volumen.
2. Ahora se podría calcular KC con la fórmula:

# Grado de disociación α

Este coeficiente se usará exclusivamente en reacciones de disociación:

Notar que el coeficiente estequiométrico de A es 1. Esto es algo que se puede hacer ajustando la reacción.

El grado de disociación es el tanto por uno del reactivo que desaparece. Se puede usar tanto con moles, como con concentraciones:

|  |  |
| --- | --- |
| Cantidad disociada: α·concentración inicial | Cantidad sin disociar: (1-α)·concentración inicial |

Veamos un ejemplo genérico de como proceder con las tablas de equilibrio para la reacción:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | A | 🡪 | B | D |
| Inicio | C0 |  | [B]0 | [D]0 |
| Reacción (1) | -α·C0 |  | +b·α·C0 | +d·α·C0 |
| Equilibrio (2) | (1-α)·C0 |  | [B]0+n·α·C0 | [C]0+n·α·C0 |

# Constante de equilibrio KP para gases

En la medida en que las presiones parciales de los gases son proporcionales a su cantidad de moles y por tanto proporcional a sus concentraciones, se define la constante de equilibrio KP para una reacción genérica:

## Relación entre KC y KP

|  |  |
| --- | --- |
|  | R: constante de los gases, R  T: temperatura en grados Kelvin.  ∆n: coeficientes estequiométricos de los productos-coeficientes estequiométricos de los reactivos. |

|  |
| --- |
| Demostración  Para la reacción:  Como la presión parcial se puede calcular con la ecuación de los gases:  Se puede sustituir esa expresión de la presión parcial en la fórmula de KP: |