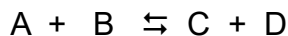
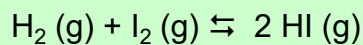


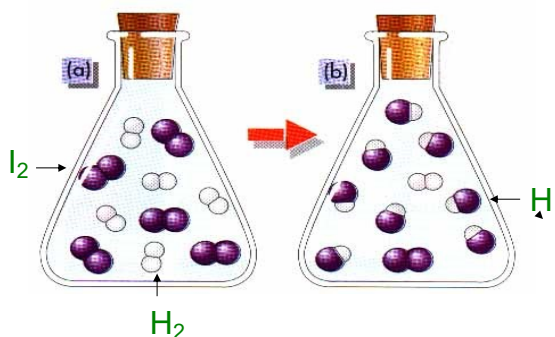
## Que és l'equilibri químic?



**Exercici 7.8.** Així la reacció química:



és una reacció química... ☐ invertible ☐ no invertible



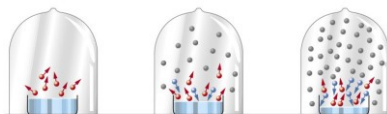
## Que és l'equilibri químic?

**Exercici 7.9.** Quan una reacció en medi líquid arriba a l'equilibri termodinàmic, la densitat de la dissolució ...☐ es manté constant ☐ varia perquè el procés és dinàmic.

A nivell **microscòpic**, el sistema evoluciona en ambdós sentits:

- Molècules de líquid passen a fase gas
- Molècules de gas condensen i passen al líquid

S'estableix un **equilibri dinàmic**

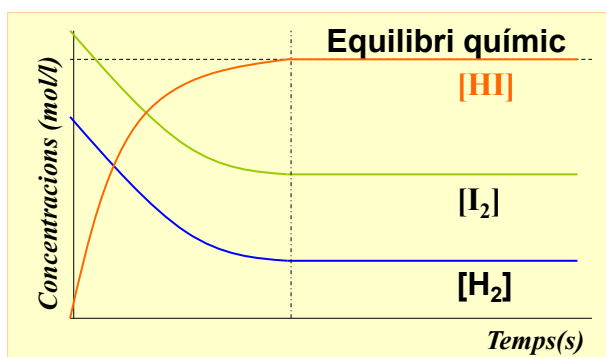


**Exercici 7.10.** En el procés anterior, què passaria si en lloc del líquid partíssim del gas a una pressió elevada (superior a la seva pressió de vapor)?

## Aspectes quantitativs de l'equilibri: constant d'equilibri K

$$V_R (\text{directa}) = V_R (\text{inversa}) \quad \Rightarrow \quad k_v [I_2] [H_2] = k_v' [HI]^2$$

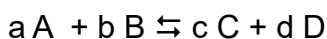
$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H_2] \times [I_2]}$$



## Aspectes quantitativs de l'equilibri: constant d'equilibri K

**Llei d'acció de masses.** Guldberg-Waage (1864)

Per a qualsevol reacció química invertible en estat d'equilibri a una T determinada es compleix que: el producte de les concentracions molars dels productes de la reacció, elevat cada una d'elles al coeficient estequiomètric, dividit per les concentracions molars dels reactius, elevades al coeficient estequiomètric, és una constant que anomenarem : **Constant d'equilibri**.



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

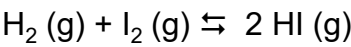
Aspectes quantitatius de l'equilibri: constant d'equilibri K

**Exercici 7.11.** En la taula següent es recullen diferents situacions inicials i a l'equilibri per a la reacció:  $I_{2(g)}+H_{2(g)}\rightleftharpoons 2HI_{(g)}$ , que s'ha dut a terme a una temperatura de 425 °C.

	Concentracions inicials (mol L <sup>-1</sup> )			Concentracions a l'equilibri (mol/L <sup>-1</sup> )		
	[H <sub>2</sub> ]	[I <sub>2</sub> ]	[HI]	[H <sub>2</sub> ]	[I <sub>2</sub> ]	[HI]
Exp 1	1	1	—	0,2127	0,2127	1,5746
Exp 2	0	0	1	0,1064	0,1064	0,7873
Exp 3	1	1	1	0,3191	0,3191	2,3619

Calculeu el valor numèric de  $K_C$  en cada experiment. Què observeu?

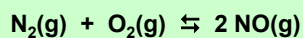
Aspectes quantitatius de l'equilibri: constant d'equilibri K



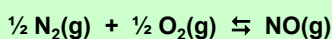
	Concentracions inicials (mol/L)			Concentracions a l'equilibri (mol/L)			$K_c$
	[H <sub>2</sub> ]	[I <sub>2</sub> ]	[HI]	[H <sub>2</sub> ]	[I <sub>2</sub> ]	[HI]	
Exp 1	1	1	—	0,2127	0,2127	1,5746	54.8
Exp 2	0	0	1	0,1064	0,1064	0,7873	54.8
Exp 3	1	1	1	0,3191	0,3191	2,3619	54.8

## Aspectes quantitativs de l'equilibri: constant d'equilibri K

**Exercici 7.12.** Determina la constant de la reacció:



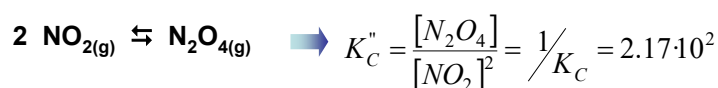
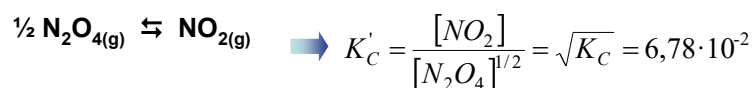
a 2200 K, sabent que la constant de la reacció :



a la mateixa temperatura val  $K_C = 2,96 \times 10^{-2}$ .

$$K'_C = (2,96 \times 10^{-2})^2 = 8,74 \times 10^{-4}$$

## Aspectes quantitativs de l'equilibri: constant d'equilibri K



## Aspectes quantitatius de l'equilibri: constant d'equilibri K



De fet té lloc a través de les etapes següents:

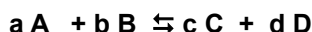


$$K_C^A = \frac{[\text{BrOOH}]}{[\text{BrH}][\text{O}_2]} \quad K_C^B = \frac{[\text{BrOH}]^2}{[\text{BrOOH}][\text{BrH}]} \quad K_C^C = K_C^{C'} = \frac{[\text{H}_2\text{O}][\text{Br}_2]}{[\text{BrOH}][\text{BrH}]}$$

$$K_C^G = \frac{[\text{H}_2\text{O}]^2[\text{Br}_2]^2}{[\text{BrH}]^4[\text{O}_2]} = K_C^A \cdot K_C^B \cdot K_C^C \cdot K_C^{C'}$$

## La constant d'equilibri termodinàmica. El concepte d'activitat



Constant d'equilibri termodinàmica:



$$K_a = \frac{a_C^c a_D^d}{a_A^a a_B^b}$$

**Activitat** = concentració efectiva / concentració efectiva en un estat de referència estàndard.

Estats de referència estàndard:

- Per a substàncies gasoses   $P^0=1\text{bar}$
- Per a substàncies en dissolució   $c^0=1\text{M}$ .
- Els sòlids i líquids purs són estats de referència.

## La constant d'equilibri termodinàmica. El concepte d'activitat

$$\text{Concentració efectiva} = \text{Concentració real} \cdot \gamma$$

- Per a una substància gasosa :

$$a_g = \gamma P_g / P^0$$

- Per a una substància en dissolució:

$$a_x = \gamma c / c^0$$

- Per a un sòlid o un líquid pur:

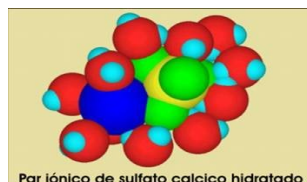
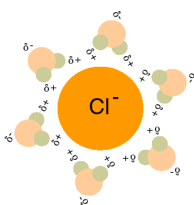
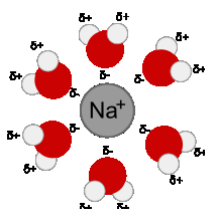
$$a_L = a_S = 1$$

$$0 \leq \gamma \leq 1$$

En dissolucions iòniques:

$$\log \gamma = \frac{-0.51 \cdot z^2 \cdot \sqrt{I}}{1 + \left( \alpha \cdot \sqrt{I} / 305 \right)}$$

$$I = \frac{1}{2} \sum_i c_i z_i^2$$



La **força iònica** (que representem per  $I$ ) és la mesura de la concentració total d'ions en dissolució

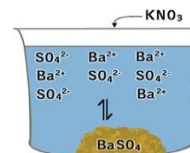
$$I = 1/2 \sum_i c_i z_i^2$$

La relació entre el coeficient d'activitat i

la força iònica ve donada per la equació de Debye-Hückel:

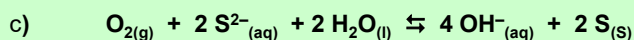
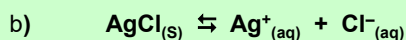
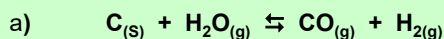
$$\log \gamma = - \frac{0.51 \cdot z^2 \cdot \sqrt{I}}{1 + \left( \alpha \cdot \sqrt{I} / 305 \right)}$$

On  $z$  i  $\alpha$  són la càrrega i les dimensions (radi hidratat en picometres,  $\text{pm} = 10^{-12} \text{ m}$ ) de l'ió



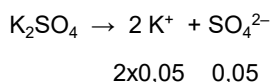
## La constant d'equilibri termodinàmica. El concepte d'activitat

**Exercici 7.13.** Escriviu l'expressió de  $K_a$  per a les reaccions següents, suposant un comportament ideal ( $\gamma = 1$ ):



## La constant d'equilibri termodinàmica. El concepte d'activitat

**Exercici 7.14.** Determineu la força iònica d'una dissolució aquosa de  $\text{K}_2\text{SO}_4$  0,05 M. Tingueu present que aquesta sal en aigua està totalment dissociada per donar cations  $\text{K}^+$  i anions  $\text{SO}_4^{2-}$ .



$$I = 1/2 \sum_i C_i z_i^2$$

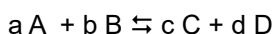
$$I = 1/2 (2 \times 0,05 \times 1^2 + 0,05 \times 2^2) = 0,15 \text{ M}$$

**Exercici 7.15.** Determineu el coeficient d'activitat de l'anió sulfat ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) de la dissolució de l'exemple anterior sabent que el radi hidratat d'aquest ió és  $\alpha = 400$  pm.

$$\log \gamma = - \frac{0,51 \cdot z^2 \cdot \sqrt{I}}{1 + \left( \alpha \cdot \sqrt{I} / 305 \right)} = - \left( (0,51 \cdot 2^2 \sqrt{0,15}) / (1 + ((400 \sqrt{0,15})/305)) \right) = -0,524$$

$$\gamma = 0,299$$

## Condicions de no equilibri. Quocient de reacció Q



Quocient de reacció:  $Q_c = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$

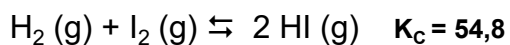
$Q < K$		evolució cap a productes
$Q > K$		evolució cap a reactius
$Q = K$		equilibri

## Condicions de no equilibri. Quocient de reacció Q

**Exercici 7.16.** Recordeu que per a la reacció:  $I_{2(g)} + H_{2(g)} \rightleftharpoons 2 HI_{(g)}$ , a una temperatura de 425 °C, heu trobat que  $K_c = 54,8$ . Cap a on evoluciona l'equilibri quan, a la mateixa temperatura, partiu d'una dissolució que és 2 M en HI i 1 M tant en  $I_2$  com en  $H_2$ ?



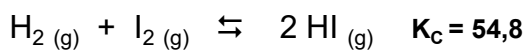
## Condicions de no equilibri. Quocient de reacció Q



	Concentracions inicials (mol/L)			Q
	[H <sub>2</sub> ]	[I <sub>2</sub> ]	[HI]	
Exp 1	0,15	0,40	—	0
Exp 2	—	—	0,70	∞
Exp 3	1	1	2	4
Exp 4	0,1	0,1	2	400

## Condicions de no equilibri. Quocient de reacció Q

**Exercici 7.17.** Determineu les concentracions a l'equilibri del sistema de l'exercici anterior.

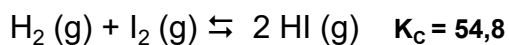


Concentracions inicials:      [H<sub>2</sub>]<sub>0</sub>      [I<sub>2</sub>]<sub>0</sub>      [HI]<sub>0</sub>

Quantitats que es desplacen:      -x      -x      +2x

Concentracions a l'equilibri:      [H<sub>2</sub>]<sub>0</sub>-x      [I<sub>2</sub>]<sub>0</sub>-x      [HI]<sub>0</sub>+2x

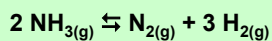
## Condicions de no equilibri. Quocient de reacció Q



	Concentracions inicials (mol/L)			Q	Concentracions finals (mol/L)		
	[H <sub>2</sub> ]	[I <sub>2</sub> ]	[HI]		[H <sub>2</sub> ]	[I <sub>2</sub> ]	[HI]
Exp 1	0,15	0,40	—	0	0,006	0,256	0,288
Exp 2	—	—	0,70	∞	0,074	0,074	0,551
Exp 3	1	1	2	4	0,425	0,425	3,149
Exp 4	0,1	0,1	2	400	0,234	0,234	1,732

## Condicions de no equilibri. Quocient de reacció Q

**Exercici 7.18.** A 450°C l'amoniac 0.1M es dissocia en un 95.1% en els seus elements.

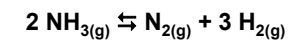


Determina la  $K_c$  d'aquesta reacció.

$$\alpha = 0,951$$

$$C_0 = 0,1 \text{ M}$$

Eq.



$$C_0 (1 - \alpha)$$

$$C_0 \alpha / 2 \quad 3 C_0 \alpha / 2$$

$$K_c = \frac{(C_0 \alpha / 2) (3 C_0 \alpha / 2)^3}{(C_0 (1 - \alpha))^2} = 5,50$$

## Condicions de no equilibri. Quocient de reacció Q

### Exercici: Pregunta 5 de la prova 4 ( Curs 2009/10)

A 100 °C la  $K_C$  de la reacció de dissociació del  $\text{PCl}_5$  (g) en  $\text{PCl}_3$ (g) i  $\text{Cl}_2$ (g) és igual a 1.2 i el calor de la reacció és de  $-17300$  cal. Es barregen 3 mols de  $\text{PCl}_3$  i 3 mols de  $\text{Cl}_2$  en un recipient de 1.5 L.

a) Determina quines són les concentracions de les tres espècies a l'equilibri.

$$[\text{PCl}_3] = [\text{Cl}_2] = 3 \text{ mols} / 1.5 \text{ L} = 2 \text{ M}$$

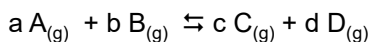


$$K_C = \frac{(2-x)(2-x)}{x} = 1.2 \Rightarrow x = 0.9387$$

$$[\text{PCl}_3] = [\text{Cl}_2] = 2 - 0.9387 = 1.0613 \text{ M}$$

$$[\text{PCl}_5] = 0.9387 \text{ M}$$

## Sistemes homogenis gasosos. Relació entre les constants



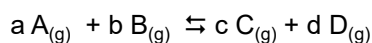
Si tots els components són gasos:

$$P_i V = n_i R T \quad \Rightarrow \quad P_i = n_i R T / V$$

$$P_i = [i] R T$$

$$K_P = \frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b}$$

## Sistemes homogenis gasosos. Relació entre les constants



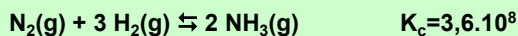
$$K_P = \frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} = \frac{([C]RT)^c ([D]RT)^d}{([A]RT)^a ([B]RT)^b}$$

$$K_P = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} (RT)^{(c+d)-(a+b)}$$

$$\boxed{K_P = K_C (RT)^{(\Delta n)}} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} R = 0.083 \text{ Bar.L.K}^{-1}\text{mol}^{-1} \\ T \rightarrow K \\ P \rightarrow \text{Bar} \\ [X]_i \rightarrow M \end{array} \right.$$

## Sistemes homogenis gasosos. Relació entre les constants

**Exercici 7.19** Quin és el valor de  $K_P$  per a la reacció de formació de l'amoníac gasós a partir de nitrogen i hidrogen, a 25 °C:

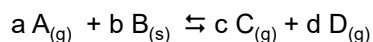


$$\begin{aligned} K_P &= K_C (RT)^{(\Delta n)} = 3,6 \cdot 10^8 (0,08315 \text{ bar L K}^{-1} \text{ mol}^{-1} 298,2 \text{ K})^{-2} \\ &= 5,86 \cdot 10^5 \end{aligned}$$

## Equilibris en sistemes heterogenis

### -Gasos i sòlids o líquids purs

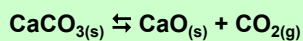
Recordem que l'activitat d'aquestes substàncies és 1



$$K_c = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a} \quad K_P = \frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a}$$

## Equilibris en sistemes heterogenis

**Exercici 7.20.** La descomposició del carbonat de calci té lloc segons la reacció següent:

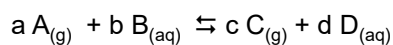


Si escalfant fins a 900 °C una certa quantitat de  $\text{CaCO}_3$  en un recipient tancat i al buit, s'assoleix una pressió parcial de  $\text{CO}_2$  d'1 atm. Quina és la  $K_P$  per a aquesta reacció a 900 °C?

$$K_P = p_{\text{CO}_2} = 1$$

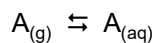
## Equilibris en sistemes heterogenis

### - Gasos i substàncies en dissolució



$$K_a = \frac{P_C^c [D]^d}{P_A^a [B]^b}$$

### - Llei de Henry



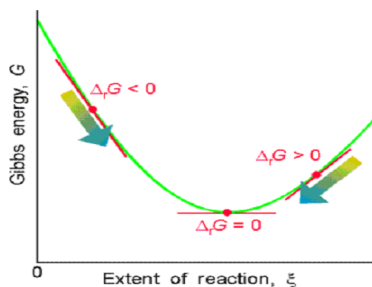
$$K_a = [A] / P_A$$

## Equilibris en sistemes heterogenis

**Exercici 7.21.** Quina és la concentració d'oxigen en aigua en equilibri amb l'atmosfera a 25 °C, si a aquesta temperatura la constant de la llei de Henry val  $K = 1,28 \cdot 10^{-3}$ ? Recordeu que l'atmosfera té un 20% d'oxigen (és a dir, la seva fracció molar és igual a 0,2) i la pressió atmosfèrica al nivell del mar és d'1 atm.

$$[O_2] = K_H \cdot P_{O_2} = 1,28 \cdot 10^{-3} (0,2 \cdot 1) = 2,56 \cdot 10^{-4} \text{ M}$$

## Bases termodinàmiques de l'equilibri. Relació $\Delta G$ - K



$$\Delta G^0 = -RT \ln K_a$$



$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln Q$$

No equilibri

$$\Delta G = RT (\ln Q/K_a) \quad \text{a P i T cts.}$$

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_a = \Delta H^0 - T \Delta S^0$$

## Bases termodinàmiques de l'equilibri. Relació $\Delta G$ - K

**Exercici 7.22.** Determineu el valor de  $K_p$  per a una reacció que a 25 °C té una  $\Delta G^0 = 2.6 \text{ kJ/mol}$ .

$$\Delta G^0 = -RT \ln K$$

$$2,6 \times 10^3 \text{ J/mol} = -8,314 \times 298 \ln K_p$$

$$\ln K_p = -2,6 \times 10^3 / 2473,4 = -1,051$$

$$K_p = 0,350$$

## Bases termodinàmiques de l'equilibri. Relació $\Delta G$ - K

**Exercici 7.23.** A 298 K una reacció química presenta un valor de  $\Delta H^0 = -52,25$  kJ mol<sup>-1</sup> i un  $\Delta S^0$  de  $-52,71$  J K<sup>-1</sup> mol<sup>-1</sup>. Calculeu el valor de  $K_p$  a aquesta temperatura.

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_a = \Delta H^0 - T \Delta S^0$$

$$\Delta G^0 = -52,25 \times 10^3 \text{ J/mol} - 298 (-52,71) \text{ J/mol} = -36542,42 \text{ J/mol}$$

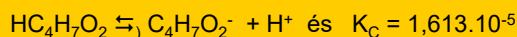
$$\Delta G^0 = -RT \ln K_a = -36542,42 = -8,3 \times 298 \times \ln K_p$$

$$\ln K_p = 14,774 \quad \longrightarrow \quad K_p = 2,61 \times 10^6$$

## Bases termodinàmiques de l'equilibri. Relació $\Delta G$ - K

**Exercici: Pregunta R-2 de la segon prova ( Curs 2010/11)**

L'àcid butíric o butanoic, HC<sub>4</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>, es fa servir per obtenir sabors artificials o perfums. A la temperatura de 25 °C la constant d'equilibri de la reacció



Respon breument i de forma raonada a les qüestions següents:

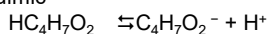
a) En preparar una solució de l'àcid en aigua a 25°C s'ha observat que la concentració de l'espècie H<sup>+</sup> en equilibri és igual a 2·10<sup>-3</sup> M. Calcula de quina concentració total de l'àcid es va partir per tal de preparar la solució. Considera que C° = 1M i que les concentracions equivalen activitats.

b) Indica quin és el valor de  $\Delta G^0$ , expressat en unitats extensives, per a la reacció  $2 \text{ C}_4\text{H}_7\text{O}_2^- + 2 \text{ H}^+ \rightleftharpoons 2 \text{ HC}_4\text{H}_7\text{O}_2$  realitzada també a 25°C.

Nota:  $\Delta G^0 = -RT \ln K$ ; R = 8,3 J K<sup>-1</sup> mol<sup>-1</sup>



a) La condició d'equilibri químic



Inicialment (M/c°):	C	0	0
En equilibri (M/c°):	C-x	x	x

$$K_c = \frac{\left(\frac{x}{2}\right)\left(\frac{x}{2}\right)}{(C-x)/c^\circ} = \frac{(2 \cdot 10^{-3})^2}{C-0.002} \quad \longrightarrow \quad C = 0.250 \text{ M.}$$

b) El valor de la constant d'equilibri de la reacció proposada és la inversa de  $K_c$  i elevada al quadrat. És a dir  $K_c' = 1/K_c^2 = 3.84353 \cdot 10^9$

Aplicant la relació  $\Delta G^0 = -RT \ln K_c'$  tenim

$$\Delta G^0 = -8.32 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} (25+273.15) \text{ K} \ln 3.84353 \cdot 10^9$$

$$\Delta G^0 = -54746.2 \text{ J}$$

**Alternativa** : També es podria haver calculat el valor de  $\Delta G^0$  a partir de  $K_c$  (a partir de la primera equació de l'enunciat) i després multiplicar el resultat per 2 i finalment capgirar el seu signe:

$$\Delta G^0 = -8.32 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} (25+273.15) \text{ K} \ln 1.613 \cdot 10^{-5}$$

$$\Delta G^0 = +27373.1 \text{ J} \quad \text{i}$$

$$\Delta G^0 = -2 \Delta G^0 = -54746.2 \text{ J}$$

## Variació de la constant amb la T. Equació de Van't Hoff

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_a = \Delta H^0 - T \Delta S^0$$

$$\ln K_1 = -\Delta H^0 / RT_1 + \Delta S^0 / R$$

$$\ln K_2 = -\Delta H^0 / RT_2 + \Delta S^0 / R$$

$$\ln \frac{K_1}{K_2} = (\Delta H^0 / R) \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

Quan la temperatura augmenta ( $T_2 > T_1$ ):

$$\Delta H^0 > 0 \quad \longrightarrow \quad K_2 > K_1$$

$$\Delta H^0 < 0 \quad \longrightarrow \quad K_2 < K_1$$

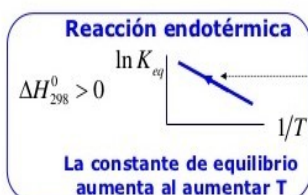
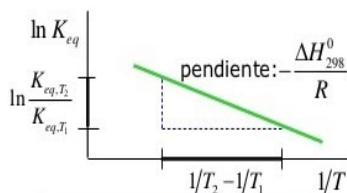
### Variació de la constant amb la T. Equació de Van't Hoff

$$\ln K_{eq} = -\frac{\Delta G_T^0}{RT} = -\frac{\Delta H_T^0 - T\Delta S_T^0}{RT} = -\frac{\Delta H_T^0}{R} \frac{1}{T} + \frac{\Delta S_T^0}{R} \approx -\frac{\Delta H_{298}^0}{R} \frac{1}{T} + \frac{\Delta S_{298}^0}{R}$$

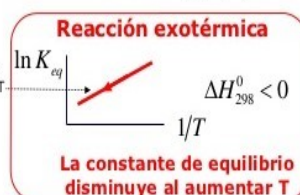
$$\ln \frac{K_{eq,T_2}}{K_{eq,T_1}} \approx -\frac{\Delta H_{298}^0}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

Ec. de Van't Hoff

[Nótese el paralelismo con la ley de Arrhenius]



dirección de aumento de T



### Variació de la constant amb la T. Equació de Van't Hoff

**Exercici 7.24.** Determineu si augmentarà o disminuirà la constant, quan en un procés exotèrmic ( $\Delta H^0 < 0$ ) disminueix la temperatura ( $T_2 < T_1$ ). I si el procés és endotèrmic? Cap a on es desplaçarà l'equilibri?

$$\ln \frac{K_1}{K_2} = (\Delta H^0 / R) \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$\Delta H^0 < 0$$

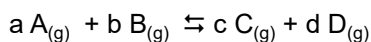
$K_2 > K_1$  desplaçament cap a productes

$$\Delta H^0 > 0$$

$K_1 > K_2$  desplaçament cap a reactius

## Efectes sobre l'equilibri. Principi de Le Châtelier-Braun

- Efecte de la pressió sobre l'equilibri



$$K_P = \frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} = \frac{(X_C P)^c (X_D P)^d}{(X_A P)^a (X_B P)^b} = \frac{X_C^c X_D^d}{X_A^a X_B^b} \frac{P^c P^d}{P^a P^b}$$

$$K_P = \frac{X_C^c X_D^d}{X_A^a X_B^b} P^{\Delta n}$$

## Efectes sobre l'equilibri. Principi de Le Châtelier-Braun

- Efecte de la pressió sobre l'equilibri

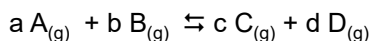
**Exercici 7.25.** Cap on es desplaçarà l'equilibri quan es redueix el volum del recipient en el qual la reacció:  $I_{2(g)} + H_{2(g)} \rightleftharpoons 2 HI_{(g)}$  havia assolit l'equilibri?

$$K_P = \frac{X_C^c X_D^d}{X_A^a X_B^b} P^{\Delta n}$$

En aquest cas : no varien els mols

## Efectes sobre l'equilibri. Principi de Le Châtelier-Braun

- Efecte de l'addició o eliminació de reactius i/o productes sobre l'equilibri



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

$Q < K$		evolució cap a productes
$Q > K$		evolució cap a reactius
$Q = K$		equilibri

## Efectes sobre l'equilibri. Principi de Le Châtelier-Braun

- Efecte de l'addició o eliminació de reactius i/o productes sobre l'equilibri

**Exercici 7.26.** Que li passarà a l'equilibri  $N_{2(g)} + 3 H_{2(g)} \rightleftharpoons 2 NH_{3(g)}$  si doblem tant la concentració d'hidrogen com la d'amoníac?

1. Calcular  $Q$
2. Comparar amb  $K$
3. Deduir el desplaçament de l'equilibri

$$Q = (2 [NH_3])^2 / (2 [H_2])^3 [N_2] \quad \xrightarrow{\text{red arrow}} \quad Q = K / 2$$

Reactius a productes  $Q < K$

## Efectes sobre l'equilibri. Principi de Le Châtelier-Braun

**Exercici 7.24.** En la reacció  $\text{CO}_{2(g)} + \text{H}_{2(g)} \rightleftharpoons \text{CO}_{(g)} + \text{H}_2\text{O}_{(g)}$  s'assoleix l'equilibri quan les concentracions són  $[\text{CO}_2] = [\text{H}_2] = 0,364 \text{ M}$  i  $[\text{CO}] = [\text{H}_2\text{O}] = 0,136 \text{ M}$  a  $550^\circ\text{C}$ . Quines són les noves concentracions a l'equilibri quan afegim  $0,5 \text{ M}$  de  $\text{CO}_2$  a l'equilibri anterior tot mantenint la temperatura?

Càlcul constant d'equilibri

$$K = [\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}] / [\text{CO}_2] [\text{H}_2] = (0,136)(0,136) / (0,364)(0,364) = 0,1396$$

Addicionem  $0,5 \text{ M}$  de  $\text{CO}_2$  :  $Q = (0,136)^2 / (0,864)(0,364) = 0,0594 \quad Q < K$

La reacció evolucionarà de reactius a productes

$$K = 0,1396 = (0,136 + x) (0,136 + x) / (0,864 - x)(0,364 - x)$$

$$\text{Equació de segon grau : } 0,443x + 0,8604x - 0,0254 = 0 \quad \rightarrow \quad x = 0,052 \text{ M}$$

$$[\text{CO}] = [\text{H}_2\text{O}] = (0,136 + 0,052) = 0,188 \text{ M}$$

$$[\text{CO}_2] = (0,864 - 0,052) = 0,812 \quad \text{i} \quad [\text{H}_2] = (0,364 - 0,052) = 0,312 \text{ M}$$