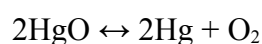
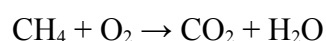


Equilibrio químico

Reacciones reversibles e irreversibles

Hasta ahora, todas las reacciones químicas con las que has trabajado han sido reacciones irreversibles, lo que quiere decir que transcurren en un solo sentido: los reactivos dan lugar a los productos y ahí se acaba todo. En las reacciones reversibles, parte de los productos pueden combinarse y “retroceder” para dar reactivos, con lo que al final lo que se obtiene es una mezcla de reactivos y productos en una determinada proporción.



La primera reacción es irreversible: lo sabemos porque la flecha es de un único sentido. En la segunda reacción, parte del mercurio y el oxígeno vuelven a combinarse para dar óxido de mercurio. Al principio, la reacción va muy rápido y casi todo el óxido de mercurio se convierte en mercurio y oxígeno, pero poco a poco se va compensando por el óxido de mercurio que viene “de vuelta”, hasta que las cantidades de productos y reactivos alcanzan una concentración de equilibrio. Ojo: en este equilibrio la reacción no se ha detenido; sigue habiendo conversiones de reactivos en productos y viceversa, pero son iguales en ambos sentidos, y por eso las concentraciones se mantienen iguales¹.

Constante de equilibrio K_c

Acabamos de ver que en el equilibrio (cuando la reacción “se calma” después de dar bandazos de reactivos a productos y de productos a reactivos) las concentraciones de los compuestos a ambos lados de la reacción son constantes. Esto se refleja en la constante de equilibrio K_c , que es igual (para eso es una constante, claro) mientras estemos en unas condiciones de presión y temperatura determinadas. Por ejemplo, para la reacción

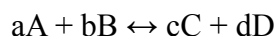


la K_c medida a 250°C y 1 atm de presión vale 0,08 mol/l. Este valor será siempre igual sean cuales sean las cantidades iniciales mientras hagamos que la reacción transcurra a esa presión y temperatura.

¹ Si quieres entender mejor por qué sucede esta “compensación”, échale un vistazo al principio de Le Chatelier.

Cajón de Ciencias

Pero ¿cuál es la fórmula que nos permite calcular esa K_c ? Si suponemos que nuestra reacción es



(donde las letras mayúsculas representan los reactivos y productos y las minúsculas los números resultantes de ajustar la reacción), la K_c sería la siguiente:

$$K_c = [C]^c[D]^d / [A]^a[B]^b$$

Es decir, multiplicar las concentraciones de los productos² (cada una elevada a su coeficiente de la reacción) y dividir por lo que nos dé de multiplicar las concentraciones de los reactivos (elevados también a sus respectivos coeficientes). Quédate con esta fórmula: es sencillita y pronto veremos unas cuantas más que se le parecen un montón.

Vamos con un ejemplo:

Ejemplo 1: En un recipiente de un litro tenemos inicialmente 0,7 moles de PCl_5 . Si calentamos a $250^\circ C$ y 1 atm , en el equilibrio se forman 0,2 moles de Cl_2 . Calcular la constante de equilibrio correspondiente a la disociación de PCl_5 y las concentraciones de cada una de las especies en el equilibrio.

Primero escribimos la reacción, que es la misma que habíamos citado en la explicación:



Comprobamos que está ajustada (lo está, pero **hay que comprobarlo**) y organizamos los datos en una pequeña tabla³:

	PCl_5	PCl_3	Cl_2
Moles iniciales	0,7	0	0
Moles en el equilibrio	?	?	0,2

Ahora razonemos un poco: como la reacción transcurre mol a mol (un mol de pentacloruro de fósforo nos da un mol de tricloruro de fósforo más un mol de cloro molecular), si se han formado 0,2 moles de Cl_2 , han debido formarse también 0,2 moles de PCl_3 . Y si se han formado 0,2 moles de

² Aquí hemos indicado dos productos y dos reactivos, pero en la fórmula habría tantos términos en el numerador como productos, y tantos términos en el denominador como reactivos.

³ Cuando tengas más práctica, la tabla no será necesaria, pero vamos a aprender a andar antes de aprender a correr.

Cajón de Ciencias

Cl₂ es porque se han gastado 0,2 moles de PCl₅. Por lo tanto, las concentraciones en el equilibrio serán:

	PCl ₅	PCl ₃	Cl ₂
Moles iniciales	0,7	0	0
Moles en el equilibrio	0,7 - 0,2 = 0,5	0,2	0,2

Ya tenemos la segunda mitad del problema resuelta. Vamos a calcular la K_c. Ten en cuenta que, como el volumen es de un litro (nos lo dice el enunciado), las concentraciones molares coinciden con el número de moles de cada compuesto:

$$K_c = 0,2^1 \cdot 0,2^1 / 0,5^1 = 0,08 \text{ mol/l}$$

NOTA IMPORTANTE: como los exponentes de cada término pueden variar según la reacción de la que estemos hablando (ya que esos exponentes son los números que salen de ajustar la reacción), las unidades de la K_c también pueden variar. Ten en cuenta que cada término es un mol/l, que se simplificarán con los de abajo hasta el punto en que sea posible. En la K_c del ejemplo, en el numerador hay mol²/l², y en el denominador mol/l. Simplificando queda mol/l.

Grado de disociación

El grado de disociación es el tanto por uno (lo mismo que el porcentaje, pero dividido entre 100) de la concentración de los reactivos que acaba transformándose en productos en el equilibrio. Se representa con la letra α , y su fórmula (tan sencilla que casi ni merece llamarse fórmula) es:

$$\alpha = x / A_0$$

Donde x es la cantidad de moles de reactivo que se transforman en productos y A_0 la cantidad de moles iniciales del reactivo. Tomando como ejemplo el ejercicio que acabamos de hacer hace un momentito (donde 0,7 moles de PCl₅ acaban siendo 0,5 moles en el equilibrio), el grado de disociación sería:

$$\alpha = 0,2 / 0,7 = 0,29$$

Ejemplo 2: En un recipiente de un litro se introducen 0,30 moles de CO₂ y 0,60 moles de H₂ y se calienta a 1000°C hasta alcanzar el equilibrio. Calcular el grado de disociación de cada uno de los reactivos y el número de moles en el equilibrio de las distintas especies, sabiendo que la K_c es igual a 1,30.

Cajón de Ciencias

Primero, escribimos y ajustamos la reacción que se produce:



Organizamos los datos en una tabla:

	CO ₂	H ₂	CO	H ₂ O
Moles iniciales	0,3	0,6	0	0
Moles en el equilibrio	0,3 - x	0,6 - x	x	x

Sabemos que se pierden x moles de cada reactivo y se forman x moles de cada producto porque la reacción transcurre mol a mol (todos los coeficientes de la reacción ajustada valen 1). Si, por un supuesto, el CO llevara un 2 en la reacción ajustada, se perderían x moles de cada reactivo, se formarían x moles de agua y *2x moles de CO*. Pero dejemos a un lado el supuesto y volvamos al ejercicio real. Como conocemos la K_c, podemos plantear su fórmula:

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

$$1,30 = x \cdot x / (0,3-x)(0,6-x)$$

$$1,3 = x^2 / (0,18 - 0,9x + x^2)$$

$$1,3x^2 - 1,17x + 0,234 = x^2$$

$$0,3x^2 - 1,17x + 0,234 = 0$$

$$x_1 = 3,68$$

$$x_2 = 0,21$$

Descartamos el valor de 3,68 ¡No es posible que se transformen 3,68 moles cuando al principio había solo 0,3 moles de CO₂! ⁴ Por lo tanto, las concentraciones en el equilibrio serán:

$$[\text{CO}_2] = 0,3 - 0,21 = 0,09 \text{ mol/l}$$

$$[\text{H}_2] = 0,6 - 0,21 = 0,39 \text{ mol/l}$$

$$[\text{CO}] = [\text{H}_2\text{O}] = 0,21 \text{ mol/l}$$

Vamos con el grado de disociación.

$$\alpha_{\text{CO}_2} = 0,21/0,3 = 0,7$$

$$\alpha_{\text{H}_2} = 0,21/0,6 = 0,35$$

⁴ No te preocupes, siempre habrá un valor que podamos descartar, o bien porque sea negativo o bien por ser mayor que alguna de las cantidades iniciales. No pueden salirte dos valores válidos.

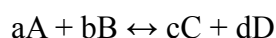
Cajón de Ciencias

Otra constante de equilibrio: la K_p

Si todos los compuestos que intervienen en una reacción son gases, la situación de equilibrio también puede representarse con otra constante, la K_p o constante de las presiones parciales. Recordemos que la presión parcial de un gas es la parte de la presión total de una mezcla que es debida a ese gas, en función de su proporción respecto al total de moles de la mezcla (lo que se llama fracción molar, simbolizada con X):

$$P_p = P_t \cdot X = P_t \cdot (\text{n}^\circ \text{ moles del gas}) / (\text{n}^\circ \text{ de moles totales})$$

Si tenemos la reacción



se cumple que, en el equilibrio:

$$K_p = P_C^c \cdot P_D^d / P_A^a \cdot P_B^b$$

Donde P_C^c es la presión parcial de C elevada al coeficiente que le toque al ajustar la reacción, y así con el resto. Como pasaba con la K_c , la K_p es constante para una presión y temperatura determinadas. Y, por si no te habías fijado, la fórmula de la K_p es calcada a la de la K_c , con lo que no te será difícil memorizarla.

Por si fuera poco, hay otra fórmula clavada a las anteriores que usa las fracciones molares, aunque en realidad no se utiliza mucho:

$$K_x = X_C^c \cdot X_D^d / X_A^a \cdot X_B^b$$