

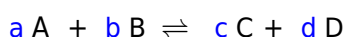
Balances de materia en equilibrios químicos

Los cálculos que se hacen en los equilibrios químicos están basados en la conservación de la materia mediante balances de materia aplicados a las reacciones químicas implicadas.

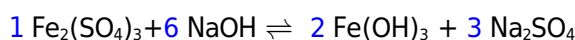
Estos balances de materia pueden variar en función de la magnitud que utilicemos para hacer el balance.

El caso más directo es el de hacer un balance mediante las cantidades de sustancia en moles implicadas en el equilibrio, pero se pueden hacer igualmente utilizando concentraciones molares, fracciones molares o, en el caso de gases, presiones parciales.

En todos los casos vamos a utilizar como referencia un equilibrio del tipo:



En las que las minúsculas son los coeficientes estequiométricos y las mayúsculas son las sustancias implicadas, como en:



Los datos iniciales tendrán un subíndice 0 y los datos en el equilibrio tendrán un subíndice e.

Balances de materia mediante cantidades de sustancia.

En este caso haremos balance de la cantidad de sustancia en moles que haya en cada estado (inicial o en el equilibrio). La variación de cantidad de sustancia será x (moles).

	a A +	b B	\rightleftharpoons	c C +	d D
Cantidad de sustancia inicial	n_{0A}	n_{0B}		n_{0C}	n_{0D}
Cantidad de sustancia disociada	-ax	-bx		+cx	+dx
Cantidad de sustancia en el equilibrio	$n_{0A}-ax$	$n_{0B}-bx$		$n_{0C}+cx$	$n_{0D}+dx$

Por ejemplo:

	2 NO ₂ (g)	\rightleftharpoons	2 NO (g) +	1 O ₂ (g)
Cantidad de sustancia inicial	$n_{0 \text{ NO}_2}$		$n_{0 \text{ NO}}$	$n_{0 \text{ O}_2}$
Cantidad de sustancia disociada	-2x		+2x	+x
Cantidad de sustancia en el equilibrio	$n_{0 \text{ NO}_2} - 2x$		$n_{0 \text{ NO}} + 2x$	$n_{0 \text{ O}_2} + x$

Relación de la cantidad de sustancia con otras magnitudes

Con la concentración molar.

Como la concentración de una sustancia A, [A] en función de la cantidad de sustancia de A, n_A es :

$$[A] = n_A / V(\text{litros})$$

Siempre podremos convertir cantidades de sustancia en concentraciones dividiendo por el volumen V en litros.

Otro procedimiento es utilizar el grado de disociación α de uno de los reactivos definiéndolo como:

$$\alpha = n_{\text{disociados}} / n_{\text{iniciales}}$$

Para una sustancia A, $n_{\text{disociados}} = ax$ y $n_{\text{iniciales}} = n_{0A}$.

Por lo tanto $\alpha = ax / n_{0A}$ y $n_{A0} \cdot \alpha = ax = n_{\text{disociados}}$ y $x = n_{A0} \cdot \alpha / a$

Como la cantidad de sustancia en el equilibrio n_{Aeq} es $n_{0A} - ax$, teniendo en cuenta lo anterior.

$$n_{Aeq} = n_{A0} - ax = n_{A0} - n_{A0} \cdot \alpha = n_{A0} (1 - \alpha)$$

Si dividimos por el volumen V obtendremos las concentraciones:

$$n_{Aeq} / V = n_{A0} (1 - \alpha) / V$$

$[A]_{eq} = [A]_0 \cdot (1 - \alpha)$ o, con otra notación, $C_{Aeq} = C_{A0} \cdot (1 - \alpha)$ y como $x = n_{A0} \cdot \alpha / a$, $x/V = C_{A0} \cdot \alpha / a$

Esta forma de calcular es más compleja si las concentraciones iniciales de los productos no son nulas:

	a A	b B	\rightleftharpoons	c C +	d D
Cantidad de sustancia inicial	n_{0A}	n_{0B}		n_{0C}	n_{0D}
Concentración inicial	n_{0A} / V	n_{0B} / V		n_{0C} / V	n_{0D} / V
Concentración en el equilibrio	$(n_{0A} - ax)/V$	$(n_{0B} - bx)/V$		$(n_{0C} + cx)/V$	$(n_{0D} + dx)/V$
Concentración en el equilibrio	$C_{A0} \cdot (1 - \alpha)$	$C_{B0} - C_{A0} \cdot \alpha \cdot b/a$		$C_{C0} + C_{A0} \cdot \alpha \cdot c/a$	$C_{D0} + C_{A0} \cdot \alpha \cdot d/a$

Pero es muy útil en reacciones con un sólo reactivo y concentraciones iniciales de los productos nulas:

	a A	\rightleftharpoons	c C +	d D
Cantidad de sustancia inicial	n_{0A}		0	0
Concentración inicial	n_{0A} / V		0	0
Concentración en el equilibrio	$(n_{0A} - ax)/V$		cx/V	dx/V
Concentración en el equilibrio (Con C_{C0} y C_{D0} nulas)	$C_{A0} \cdot (1 - \alpha)$		$C_{A0} \cdot \alpha \cdot c/a$	$C_{A0} \cdot \alpha \cdot d/a$

Con presiones parciales:

Si trabajamos con presiones parciales, podremos aplicar la ley de Dalton a gases ideales:

$$p_A = n_A RT/V \quad \text{y, considerando } n_A/V = C_A, \quad p_A = C_A RT$$

Por tanto:

	$a A +$	$b B$	\rightleftharpoons	$c C +$	$d D$
Cantidad de sustancia inicial	n_{0A}	n_{0B}		n_{0C}	n_{0D}
Concentración inicial	$C_{A0} = n_{0A} / V$	$C_{B0} = n_{0B} / V$		$C_{C0} = n_{0C} / V$	$C_{D0} = n_{0D} / V$
Presiones iniciales	$p_{A0} = C_{A0} RT$	$p_{B0} = C_{B0} RT$		$p_{C0} = C_{C0} RT$	$p_{D0} = C_{D0} RT$
Concentración en el equilibrio	$(n_{0A}-ax)/V =$ C_{Aeq}	$(n_{0B}-bx)/V =$ C_{Beq}		$(n_{0C}+cx)/V =$ C_{Ceq}	$(n_{0D}+dx)/V =$ C_{Deq}
Presiones en el equilibrio (p_{eq})	$p_{Aeq} = C_{Aeq} RT =$ $[n_{0A}-ax] RT/V =$ $[C_{A0}-ax/V] RT =$ $p_{A0} -ax [RT/V]$	$p_{Beq} = C_{Beq} RT =$ $[n_{0B}-bx] RT/V =$ $[C_{B0}-bx/V] RT =$ $p_{B0} -bx [RT/V]$		$p_{Ceq} = C_{Ceq} RT =$ $[n_{0C}+cx] RT/V =$ $[C_{C0}+cx/V] RT =$ $p_{C0} +cx [RT/V]$	$p_{Deq} = C_{Deq} RT =$ $[n_{0D}+dx] RT/V =$ $[C_{D0}+dx/V] RT =$ $p_{D0} +dx [RT/V]$

Estas expresiones se simplifican mucho si $b=0$ (sólo un reactivo) y las concentraciones iniciales de los productos son nulas ($n_{0C} = 0$ y $n_{0D} = 0$):

	$a A$	\rightleftharpoons	$c C +$	$d D$
Cantidad de sustancia inicial	n_{0A}		0	0
Concentración inicial	$C_{A0} = n_{0A} / V$		0	0
Presiones iniciales	$p_{A0} = C_{A0} RT$		0	0
Concentración en el equilibrio	$(n_{0A}-ax)/V =$ C_{Aeq}		$cx/V = C_{Ceq}$	$dx/V = C_{Deq}$
Presiones en el equilibrio (p_{eq})	$p_{Aeq} = C_{Aeq} RT =$ $[n_{0A}-ax] RT/V =$ $[C_{A0}-ax/V] RT =$ $p_{A0} -ax [RT/V]$		$p_{Ceq} = C_{Ceq} RT =$ $= cx RT/V$	$p_{Deq} = C_{Deq} RT =$ $= dx RT/V$

Por ejemplo:

	2 NO_2	\rightleftharpoons	$2 \text{ NO} +$	1 O_2
Cantidad de sustancia inicial	$n_{0 \text{ NO}_2}$		0	0
Concentración inicial	$C_{\text{NO}_2 0} = n_{0 \text{ NO}_2} / V$		0	0
Presiones iniciales	$P_{\text{NO}_2 0} = n_{0 \text{ NO}_2} RT/V$		0	0
Concentración en el equilibrio	$\frac{n_{0 \text{ NO}_2} - 2x}{V} = C_{\text{NO}_2 \text{ eq}}$		$\frac{2x}{V} = C_{\text{NO eq}}$	$\frac{x}{V} = C_{\text{O}_2 \text{ eq}}$
Presiones en el equilibrio (p_{eq})	$p_{\text{NO}_2 \text{ eq}} = C_{\text{NO}_2 \text{ eq}} RT =$ $= [n_{\text{NO}_2 0} - 2x] RT/V =$ $= [C_{\text{NO}_2 0} - 2x/V] RT =$ $= p_{\text{NO}_2 0} - 2x [RT/V]$		$p_{\text{NO eq}} = C_{\text{NO eq}} RT$ $= 2x RT / V$	$P_{\text{O}_2 \text{ eq}} = C_{\text{O}_2 \text{ eq}} RT$ $= x RT/V$

Con fracciones molares:

Recordemos que la fracción molar de A (X_A) en una disolución es la cantidad de sustancia de A (n_A) entre la cantidad de sustancia total (n_T):

$$X_A = n_A / n_T$$

Por tanto:

	$a \text{ A} +$	$b \text{ B}$	\rightleftharpoons	$c \text{ C} +$	$d \text{ D}$
Cantidad de sustancia inicial	n_{0A}	n_{0B}		n_{0C}	n_{0D}
Cantidad de sustancia inicial total (n_{T0})	$n_{0T} = n_{0A} + n_{0B} + n_{0C} + n_{0D}$				
Fracción molar inicial	$X_{0A} = n_{0A} / n_{0T}$	$X_{0B} = n_{0B} / n_{0T}$		$X_{0C} = n_{0C} / n_{0T}$	$X_{0D} = n_{0D} / n_{0T}$
Cantidad de sustancia disociada	$-ax$	$-bx$		$+cx$	$+dx$
Cantidad de sustancia en el equilibrio	$n_{0A} - ax$	$n_{0B} - bx$		$n_{0C} + cx$	$n_{0D} + dx$
Cantidad de sustancia total en el eq. (n_{Teq}) haciendo $\Delta n = c + d - a - b$	$n_{\text{Teq}} = n_{0A} - ax + n_{0B} - bx + n_{0C} + cx + n_{0D} + dx = n_{0T} + \Delta n x$				
Fracción molar en el equilibrio	$(n_{0A} - ax) / n_{\text{Teq}}$	$(n_{0B} - bx) / n_{\text{Teq}}$		$(n_{0C} + cx) / n_{\text{Teq}}$	$(n_{0D} + dx) / n_{\text{Teq}}$