

Equilibrio Químico y Termodinámica

Objetivos

Equilibrio químico y Termodinámica

- Definir energía libre de Gibbs.
- Relacionar la Energía libre de Gibbs con la constante de equilibrio.
- Identificar la variación de la Energía libre de Gibbs en función del avance de la reacción.
- Calcular la dependencia de los equilibrios con la temperatura

Energía libre de Gibbs

$$G = H - TS$$

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

Sólo vale para el sistema, a presión y temperatura constantes.

En condiciones estándar:

$$\Delta G^{\circ} = \Delta H^{\circ} - T \Delta S^{\circ}$$

En condiciones que no son del estado estándar para predecir la dirección de la reacción se debe usar

ΔG en vez de ΔG°

La relación entre ΔG y ΔG° es:

$$\Delta G = \Delta G^{\circ} + RT \ln Q$$

Convenciones para los estados estándar

Estado de la materia	Estado estándar
Gas	1 atm de presión
Líquido	líquido puro
Sólido	sólido puro
Elementos*	ΔG°_f (elemento) = 0
Disolución	Concentración 1 molar

$$\Delta G^{\circ} = \Delta H^{\circ} - T \Delta S^{\circ}$$

$$\Delta G = \Delta G^{\circ} + RT \ln Q$$

En el equilibrio

$$0 = \Delta G^{\circ} + RT \ln Q$$

$$\Delta G^{\circ} = -RT \ln K$$

$$\Delta G^{\circ} = -RT \ln K$$

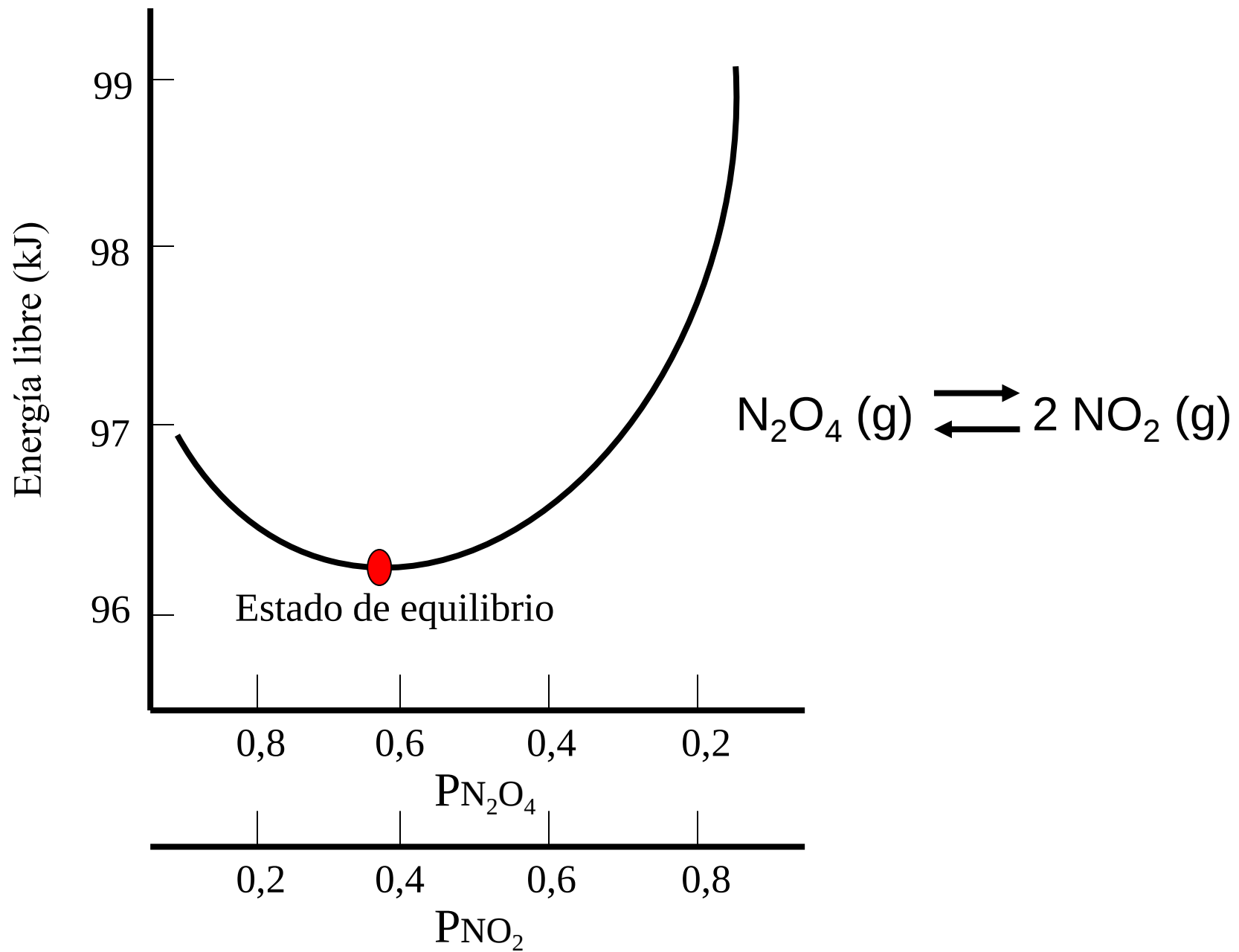
$$K = e^{-\Delta G^{\circ}/RT}$$

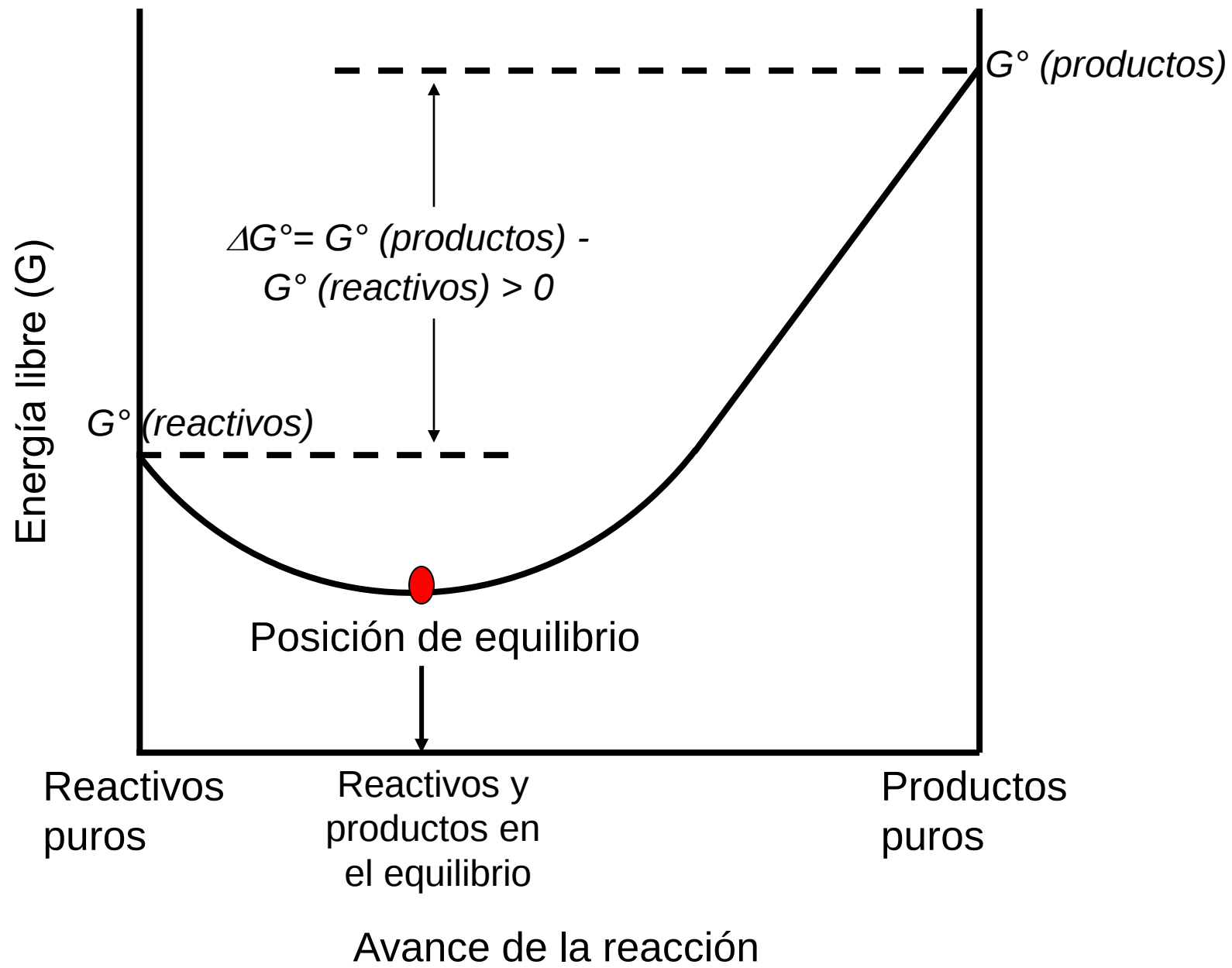
Si $\Delta G^{\circ} < 0$ entonces $K > 1$

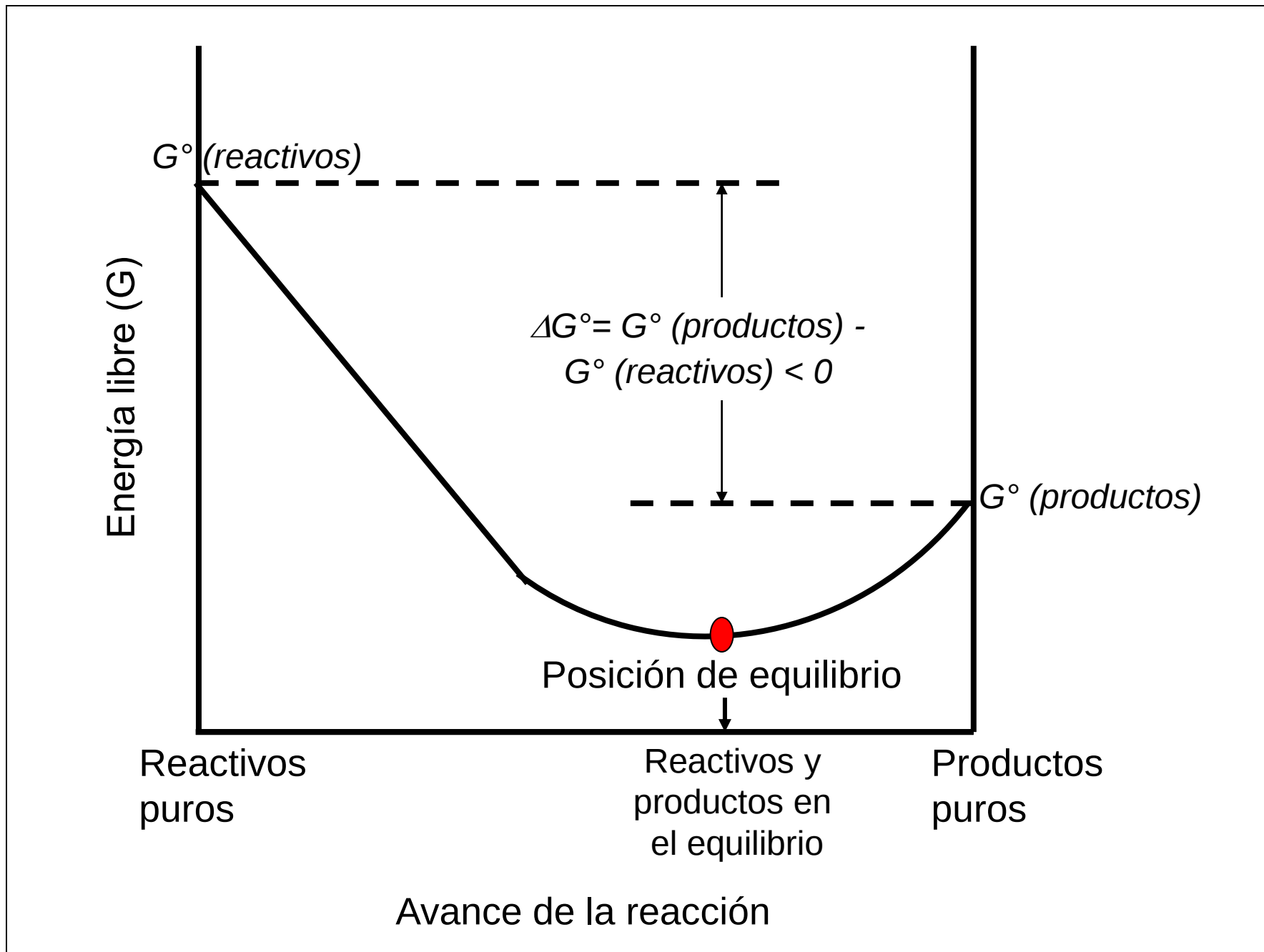
Si $\Delta G^{\circ} > 0$ entonces $K < 1$

Relación entre ΔG° y K de acuerdo con la ecuación $\Delta G^\circ = -RT \ln K$

K	$\ln K$	ΔG°	Comentario
> 1	Positivo	Negativo	En el equilibrio se ve favorecida la formación de productos sobre los reactivos
$= 1$	0	0	En el equilibrio la formación de reactivos y productos está igualmente favorecida
< 1	Negativo	Positivo	En el equilibrio se ve favorecida la formación de reactivos sobre los productos







A partir de:

$$K = e^{-\Delta G^\circ/RT}$$

Combinando con $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$

$$K = e^{\Delta S^\circ/R} e^{-\Delta H^\circ/RT}$$

Cuanto mayor sea ΔS y más negativo ΔH , mayor será K

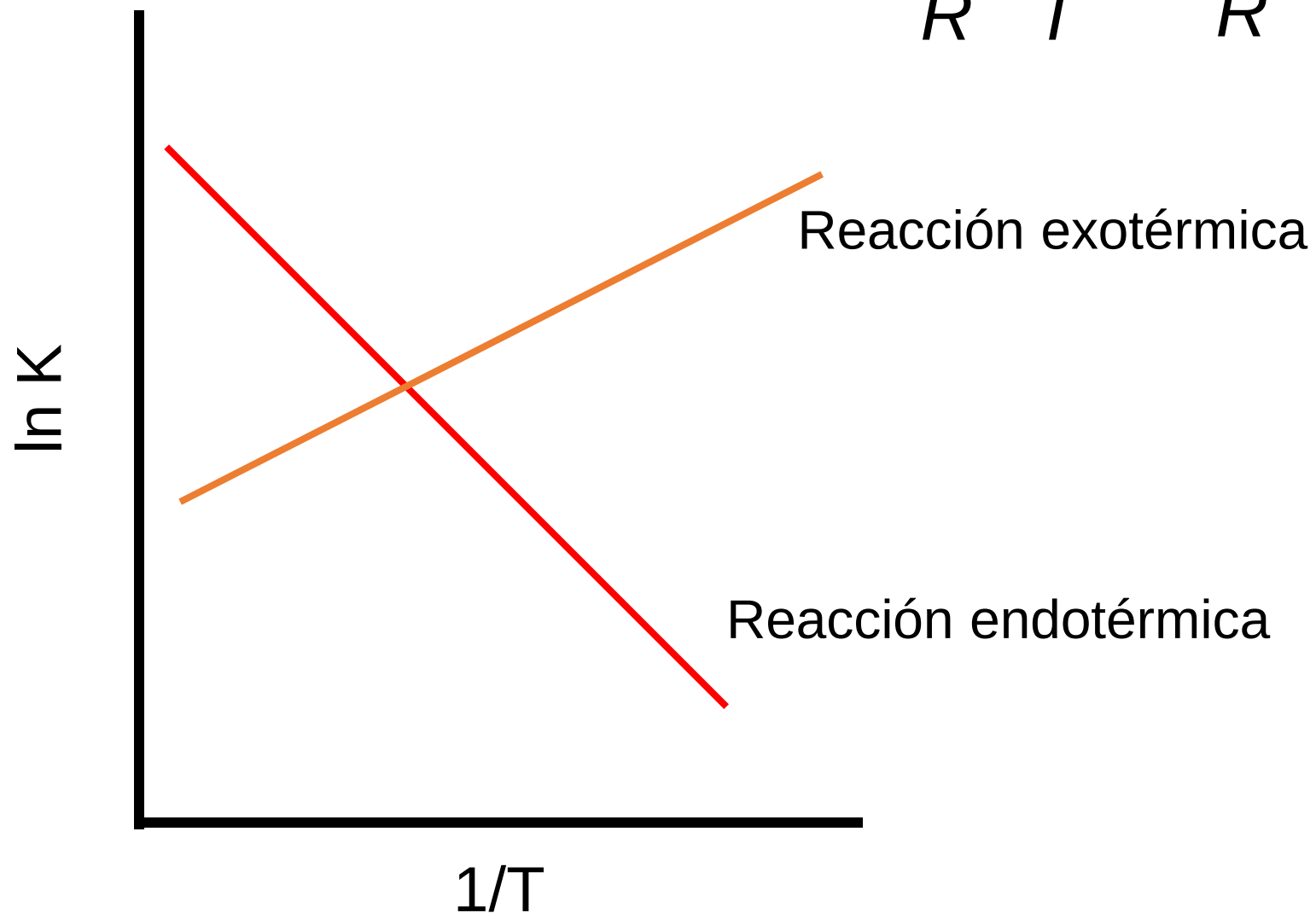
Dependencia de los equilibrios con respecto a la temperatura

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

Combinando con $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$

$$\ln K = -\frac{\Delta H^\circ}{RT} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$$

$$\ln K = -\frac{\Delta H^\circ}{R} \frac{1}{T} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$$



$$\ln K = -\frac{\Delta H^\circ}{RT} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$$

$$\ln K_1 = -\frac{\Delta H^\circ}{RT_1} + \frac{\Delta S^\circ}{R} \quad \ln K_2 = -\frac{\Delta H^\circ}{RT_2} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$$

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