

## 12. Equilibri químic.

Nivell: Batxillerat.

### 12.1. Descripció

En la pantalla de presentació del model, el text explica de forma resumida alguns conceptes elementals: què és l'equilibri químic, què és una reacció reversible, com es calcula la constant d'equilibri i com influeix el valor de la constant d'equilibri en el desplaçament de l'equilibri cap els reactius o els productes. També hi ha la representació d'una reacció reversible del tipus

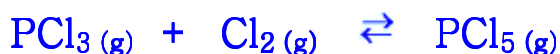


en la que es pot variar el valor de la constant d'equilibri i observar l'efecte sobre el nombre de partícules (concentració) de reactius A i productes B.

En el menú "Tipus de reaccions", es presenten, com exemple, catorze reaccions agrupades en quatre tipus diferents. En les quatre reaccions genèriques es representen totes les partícules amb el mateix diàmetre.



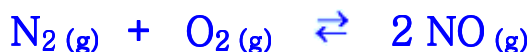
Descomposició del tetraòxid de dinitrogen.



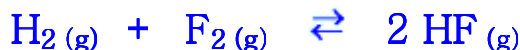
Síntesi del pentaclorur de fòsfor.



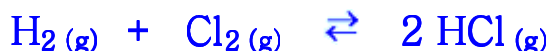
Síntesi del clorur de sulfuril.



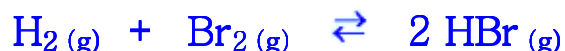
Síntesi de l'òxid de nitrogen(II).



Síntesi del fluorur d'hidrogen.



Síntesi del clorur d'hidrogen.



Síntesi del bromur d'hidrogen.



Síntesi del iodur d'hidrogen.



Monòxid de carboni i aigua formen diòxid de carboni i hidrogen.



Monòxid de carboni i diòxid de nitrogen formen diòxid de carboni i monòxid de nitrogen.

El menú "Accions" permet:

- Tornar a la situació inicial.
- Congelar la imatge per observar com estan distribuïdes les partícules en un moment determinat.
- Marcar o desmarcar una o més partícules, per poder seguir la seva evolució.

El menú "Eines" serveix per:

- Augmentar o disminuir el nombre de partícules, en funció de les prestacions reals de l'ordinador, o per veure una dissolució més concentrada.
- Canviar el diàmetre de partícula per veure millor l'acció, o ajustar-lo per tal que tingui la millor aparença en cada resolució de pantalla.
- Mesurar el temps de reacció o d'evolució de les partícules en el curs d'una reacció.
- Controlar la velocitat del procés per tal d'aprofitar al màxim les prestacions reals de l'ordinador.

En el menú "Condicions de reacció" s'ha de fixar la composició inicial que es desitgi, en % molar i en nombres enters. Quan els valors introduïts sumen 100, apareix el botó "Validar dades" que cal prémer. Comença la reacció, que té per defecte una constant d'equilibri que correspon a un nombre de partícules de reactius i productes del mateix ordre. Es pot variar la constant d'equilibri, fent que sigui dos ordres de magnitud més petita o més grossa.

El menú "Cinètica" permet adquirir dades de nombre de partícules de tots els components que es troben en la fase gasosa en funció del temps, a diferents intervals regulars o mitjançant el cronòmetre. Les dades surten en una taula a la part superior dreta de la pantalla. Un cop s'ha començat a adquirir dades, es pot aturar el procés o esborrar totalment les dades amb les opcions corresponents del mateix menú.

El menú "Finestra" conté:

- una presentació en PowerPoint i
- una introducció teòrica del tema que es tracta,
- propostes de treball, en forma de preguntes o experiències virtuals i
- la guia didàctica en la que s'expliquen particularitats de la construcció del model i es fan consideracions per treballar amb ell.

Al menú "Arxiu", l'opció "Document de text" permet obrir un document per anotar dades mentre s'està utilitzant el model. L'opció "Elaboració d'informe (Word)" conté un exemple de com es poden contestar les preguntes o fer l'informe de les experiències de les "Propostes de treball" i una fitxa en blanc que es pot utilitzar pel mateix fi. En la fitxa es pot copiar (amb el procediment de Windows de Copiar/Enganxar) el text de la pregunta feta en la proposta de treball. Aquests arxius són "Només de lectura" per tenir-los sempre disponibles i, per tant, s'han de renombrar per poder-los guardar. També permet exportar les dades i fer una gràfica Excel (Arxiu / Gràfiques Excel) a partir de les dades adquirides en el menú "Cinètica".

## 12.2. Consideracions didàctiques.

En aquest model totes les reaccions són en fase gasosa i les partícules representen molècules.

L'objectiu és estudiar la influència de les condicions inicials i el valor de la constant d'equilibri sobre l'evolució de les concentracions de reactius i productes i s'ha considerat secundari el poder veure el detall de la composició de cada molècula, que ja ve expressat per la fórmula. Altres models "Tipus de reaccions" i "Cinètica .." permeten veure el detall dels àtoms constituents de la molècula i la seva reorganització en el curs de la reacció.

Els menús "Accions", "Eines", "Condicions de reacció" i "Cinètica" estan disponibles només quan s'ha triat una reacció del menú "Tipus de reaccions".

Dins del menú "Accions", marcar una partícula "Accions / Marcar/Desmarcar partícules" permet seguir l'evolució d'una molècula concreta fins que reacciona.

Les opcions d'augmentar o disminuir el nombre de partícules, "Eines / Nombre de partícules", o canviar el diàmetre, "Eines / Diàmetre", o "Eines / Velocitat de procés" permeten veure en detall algun procés o, simplement, ajustar les possibilitats reals de l'ordinador al desenvolupament del procés. El cronòmetre, "Eines / Cronòmetre", és una eina auxiliar que funciona prement el botó de la part inferior dreta.

Variant la composició inicial i el valor de la constant d'equilibri en el menú "Condicions de reacció", es pot observar la diferent evolució de reactius i productes. Es pot fer, per exemple, posar el cent per cent de reactius amb la K per defecte, després

variar K al valor més gran i al final al més petit o viceversa. Es pot fer això per les diferents reaccions i treure', conclusions.

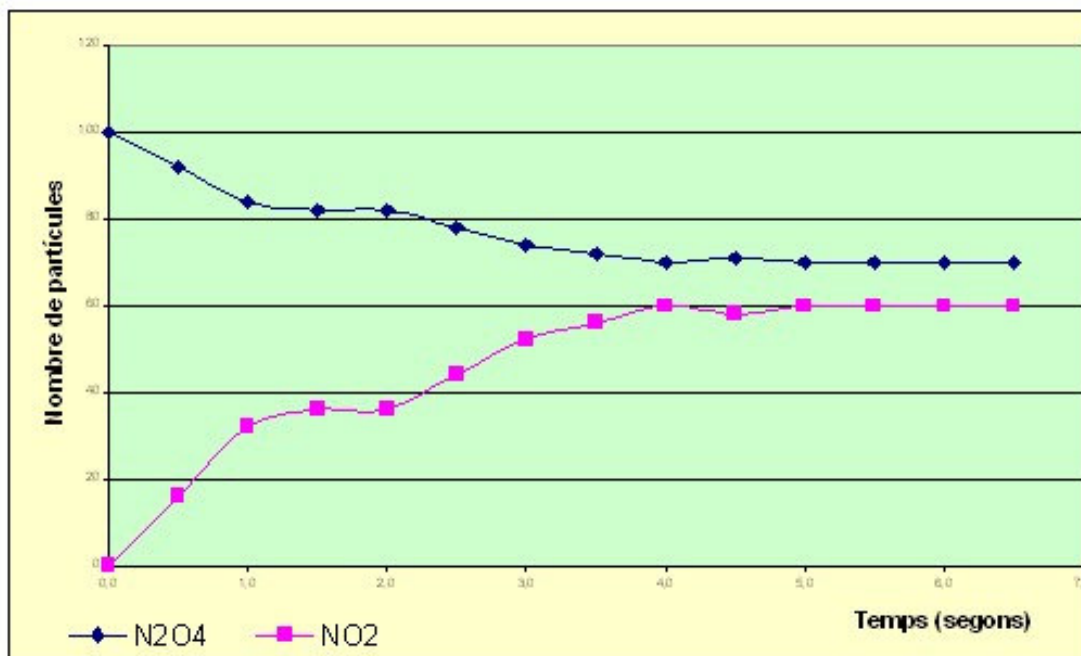
L'opció "Adquirir dades" del menú "Cinètica" permet obtenir dades de nombre de partícules i temps, a diferents interval triats per l'usuari, fins i tots a intervals diferents dins d'una mateixa taula: es pot començar cada 0,5 s i després canviar a 1 s o altres intervals. També es poden agafar dades amb el cronòmetre, esperant a veure quin és el millor moment per mesurar el nombre de partícules. L'interval més adequat per obtenir les dades depèn de la reacció que es vol estudiar i de la potència de l'ordinador, així que cal fer algunes proves abans de fer la taula definitiva.

Un cop es tenen les dades, es pot fer la gràfica en Excel (Arxiu / Gràfiques Excel) per obtenir la corba característica. En el gràfic, s'ajusta als punts una línia exponencial, que no sempre ha de ser la més adequada a les dades obtingudes. Fent clic a sobre de la línia amb el botó dret del ratolí i anant a "Formato de línea de tendencia / Tipo" es poden triar altres tipus de línies de regressió o anant a "Borrar", eliminar-la.

Cal notar que, cada vegada que es posa una nova composició inicial del menú "Condicions de reacció" s'inicia de nou la reacció i es comencen a mesurar dades. Així, per fer una gràfica, pot ser convenient seguir els passos següents:

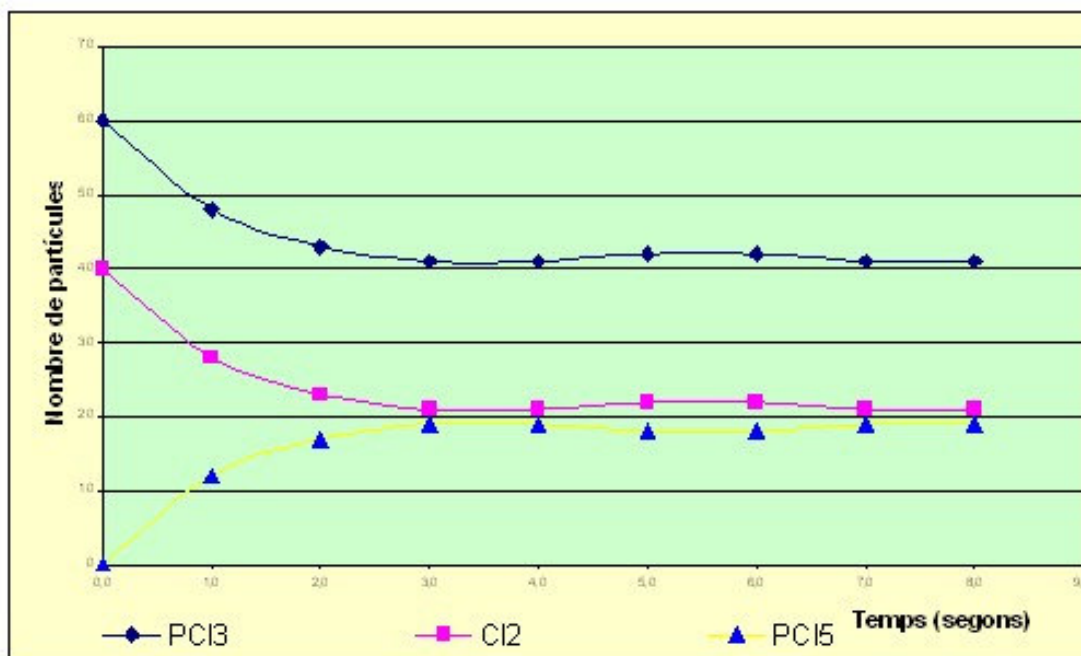
- un cop triada la reacció que es vol,
- activar l'opció "Cinètica / Adquirir dades cinètiques" i provar els intervals en els que surt millor la gràfica,
- tornar a fer clic a sobre de "Condicions de reacció / Composició inicial", per tal que comenci de nou la mesura de dades i tenir la gràfica des del principi.

Reacció:  $\text{N}_2\text{O}_4 (\text{g}) \rightleftharpoons \text{NO}_2 (\text{g})$        $K=0.02$

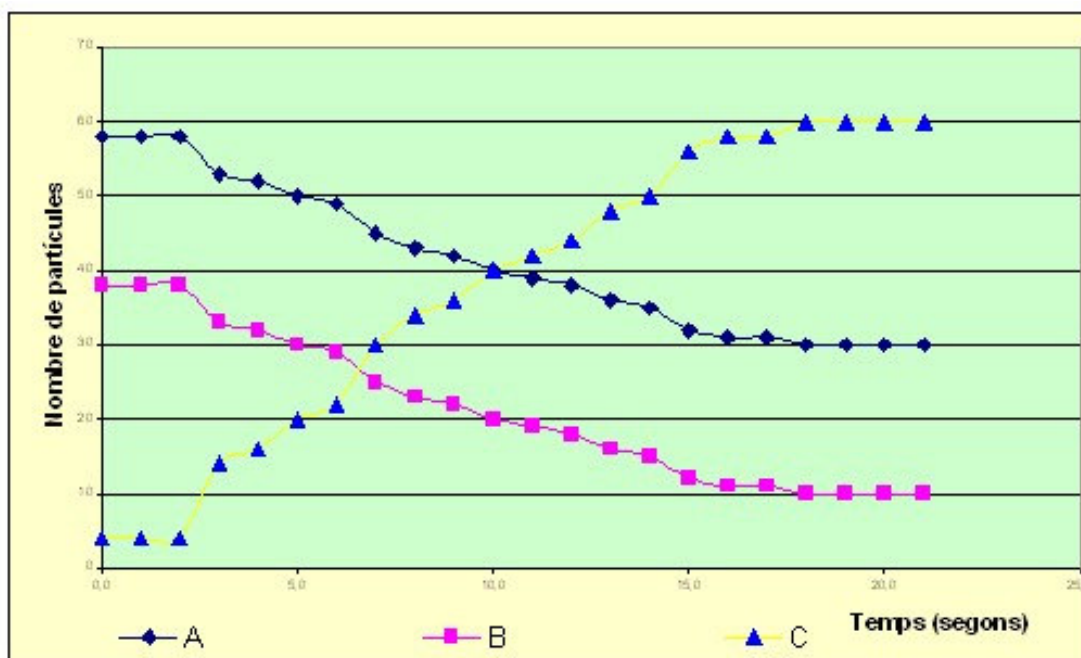




$K=0.02$



$K=100$



Reacció:  $\text{CO}_{(g)} + \text{H}_2\text{O}_{(g)} \rightleftharpoons \text{CO}_{2(g)} + \text{H}_{2(g)}$   $K=1$

