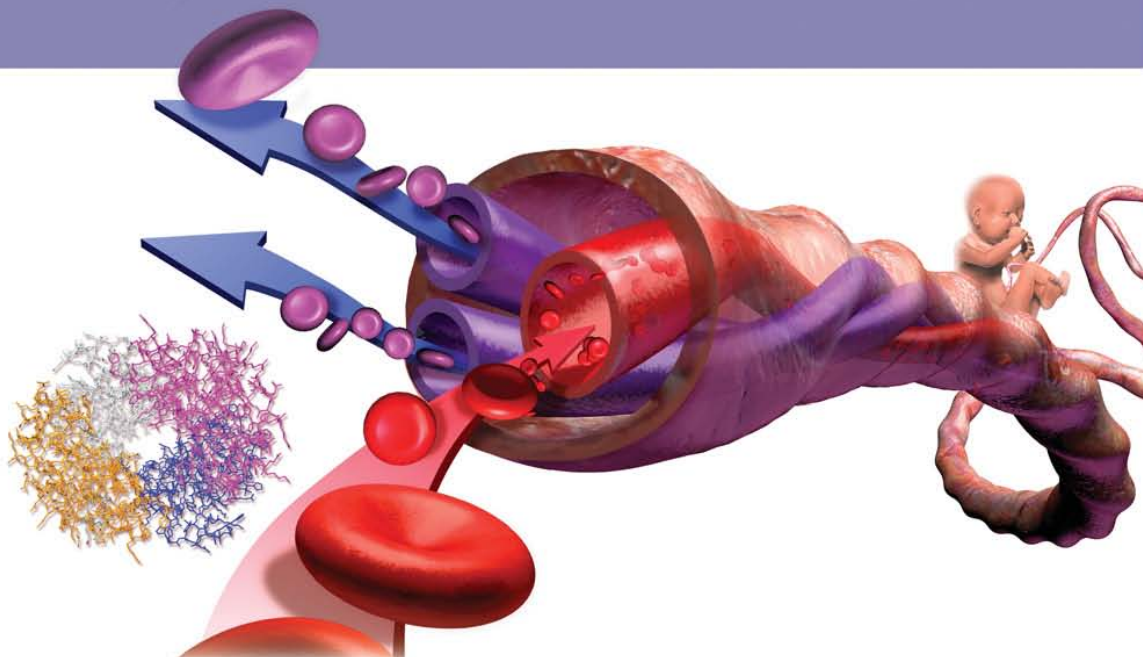


Chemistry: A Molecular Approach, 1st Ed.
Nivaldo Tro

Equilíbrio Químico

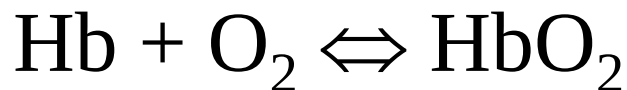
2008, Prentice Hall



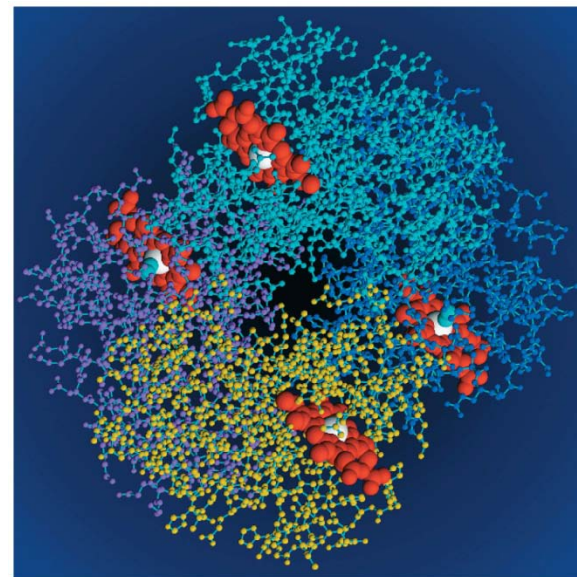
Roy Kennedy
Massachusetts Bay Community College
Wellesley Hills, MA

Hemoglobina

- proteína (Hb) encontrada nas hemácias que reage com O_2
 - ✓ aumenta a quantidade de O_2 que pode ser transportada na corrente sanguínea



- ✓ Hb representa a proteína inteira – não é uma fórmula química
- ✓ o sinal $\rightleftharpoons$ significa que a reação está em **equilíbrio dinâmico**



Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Sistema de Equilíbrio da Hemoglobina

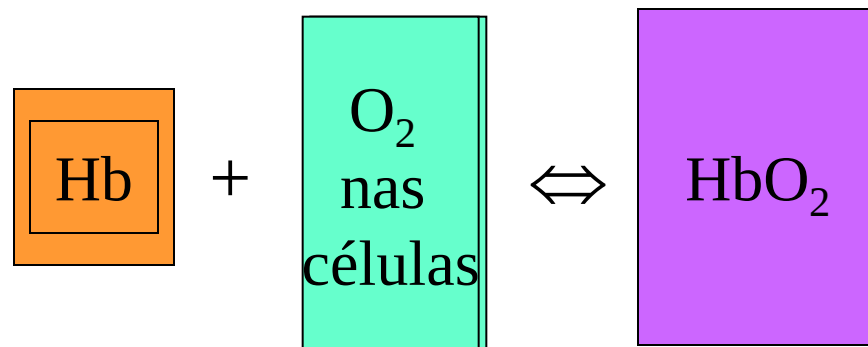


- as concentrações de Hb, O₂ e HbO₂ são todas interdependentes
- as quantias relativas de Hb, O₂ e HbO₂ no equilíbrio são relacionadas a uma constante chamada de **constante de equilíbrio, *K***
 - ✓ quanto maior o valor de *K*, mais produto é encontrado no equilíbrio
- a mudança de qualquer uma das concentrações implica na mudança das outras, restabelecendo o equilíbrio.

Transporte de O₂

nos pulmões, com elevada concentração de O₂, o equilíbrio se desloca para combinar Hb e O₂, formando mais HbO₂

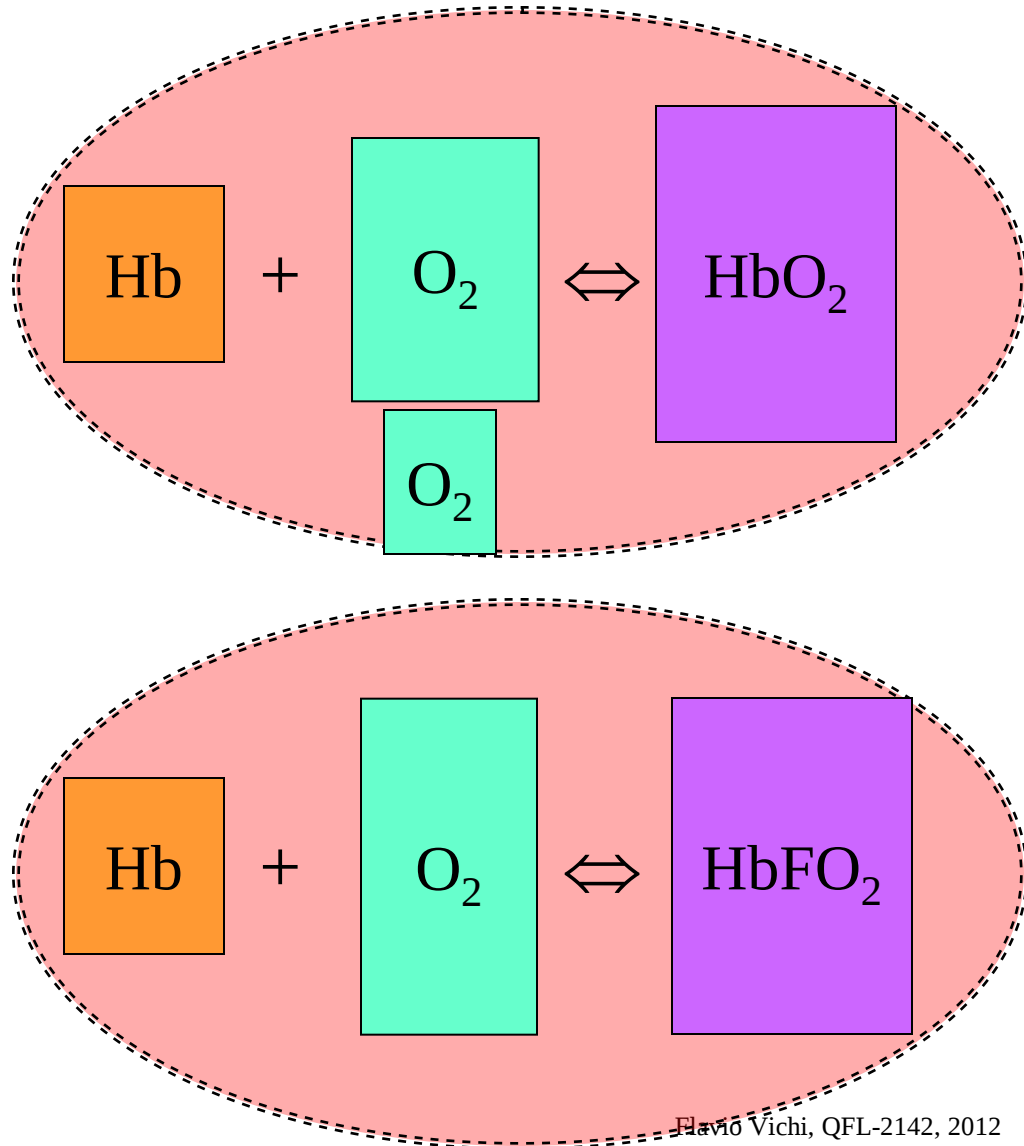
nas células, com baixa concentração de O₂, o equilíbrio se desloca para consumir HbO₂ e aumentar a quantia de O₂ livre



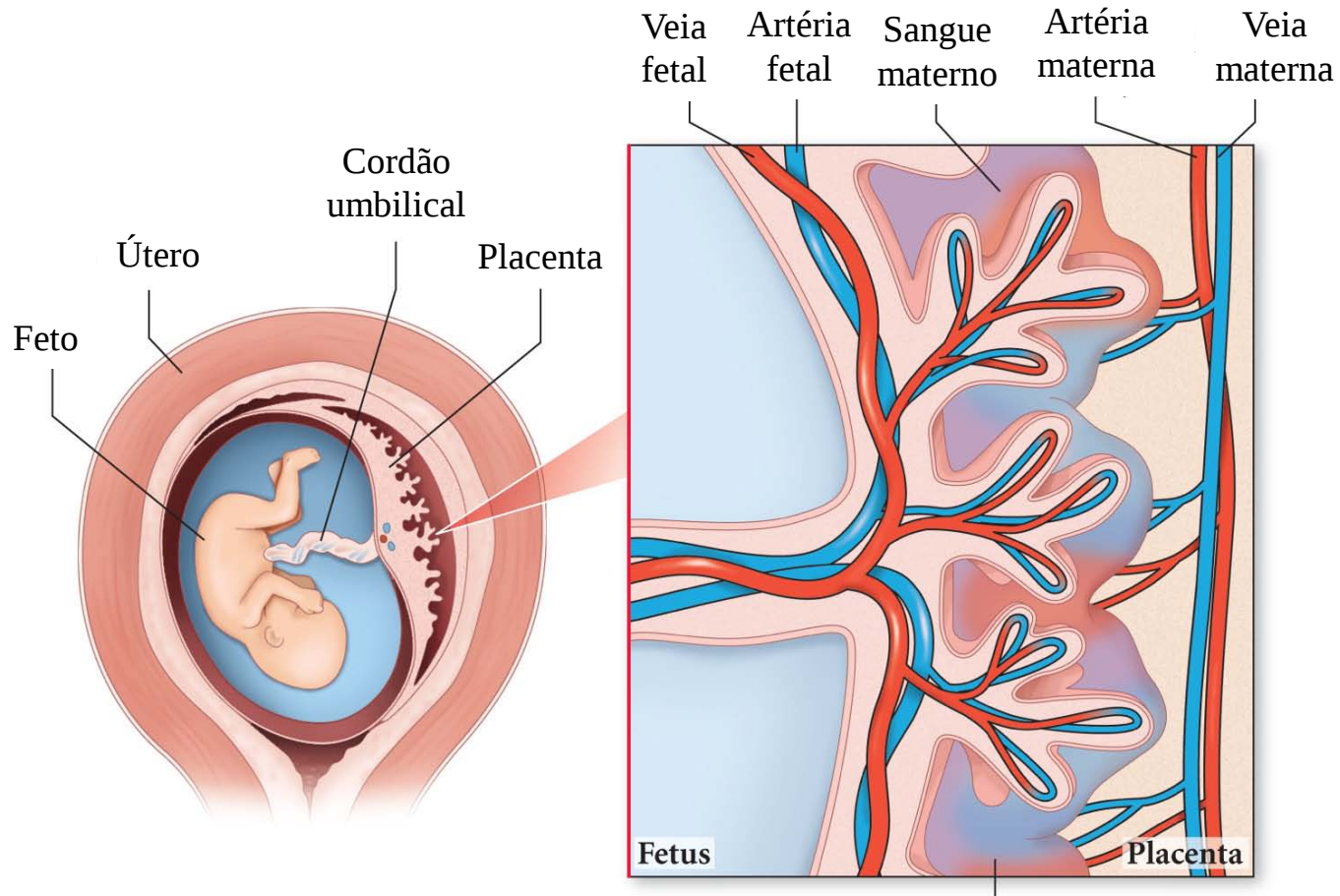
Hemoglobina Fetal, HbF



- a constante de equilíbrio da hemoglobina fetal é maior que a da hemoglobina de adultos
- como a hemoglobina fetal é mais eficiente no transporte de O_2 , este é transferido da hemoglobina da mãe para a do feto através da placenta.



Troca de Oxigênio Entre a Mãe e o Feto



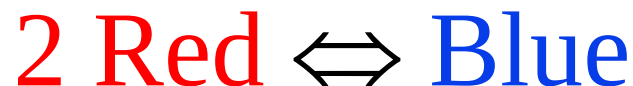
Nutrientes e dejetos são trocados entre o sangue materno e fetal através da placenta

Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Dinâmica de Reação

- quando uma reação se inicia, reagentes são consumidos e produtos são formados
 - ✓ reação direta = reagentes $\rightarrow$ produtos
 - ✓ portanto as concentrações dos reagentes diminuem e as concentrações dos produtos aumentam
 - ✓ à medida que a concentração dos reagentes diminui, a velocidade da reação direta diminui
- no fim, parte dos produtos pode reagir para formar um pouco de reagentes
 - ✓ reação inversa = produtos $\rightarrow$ reagentes
 - ✓ considerando-se que os produtos não são eliminados
 - ✓ à medida que a concentração dos produtos aumenta, a velocidade da reação inversa aumenta
- processos que ocorrem tanto na direção direta quanto na inversa são chamados de **reversíveis**
 - ✓ reagentes $\rightleftharpoons$ produtos

Reação Hipotética



Tempo	[Red]	[Blue]
0	0,400	0,000
10	0,208	0,096
20	0,190	0,105
30	0,180	0,110
40	0,174	0,113
50	0,170	0,115
60	0,168	0,116
70	0,167	0,117
80	0,166	0,117
90	0,165	0,118
100	0,165	0,118
110	0,164	0,118
120	0,164	0,118
130	0,164	0,118
140	0,164	0,118
150	0,164	0,118

A reação fica mais lenta com o tempo,

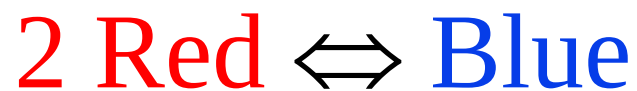
Mas as moléculas de Red nunca acabam!

Em algum ponto entre 100 e 110 s,
as concentrações tanto de Red como de
Blue não mudam mais –
o equilíbrio foi atingido.

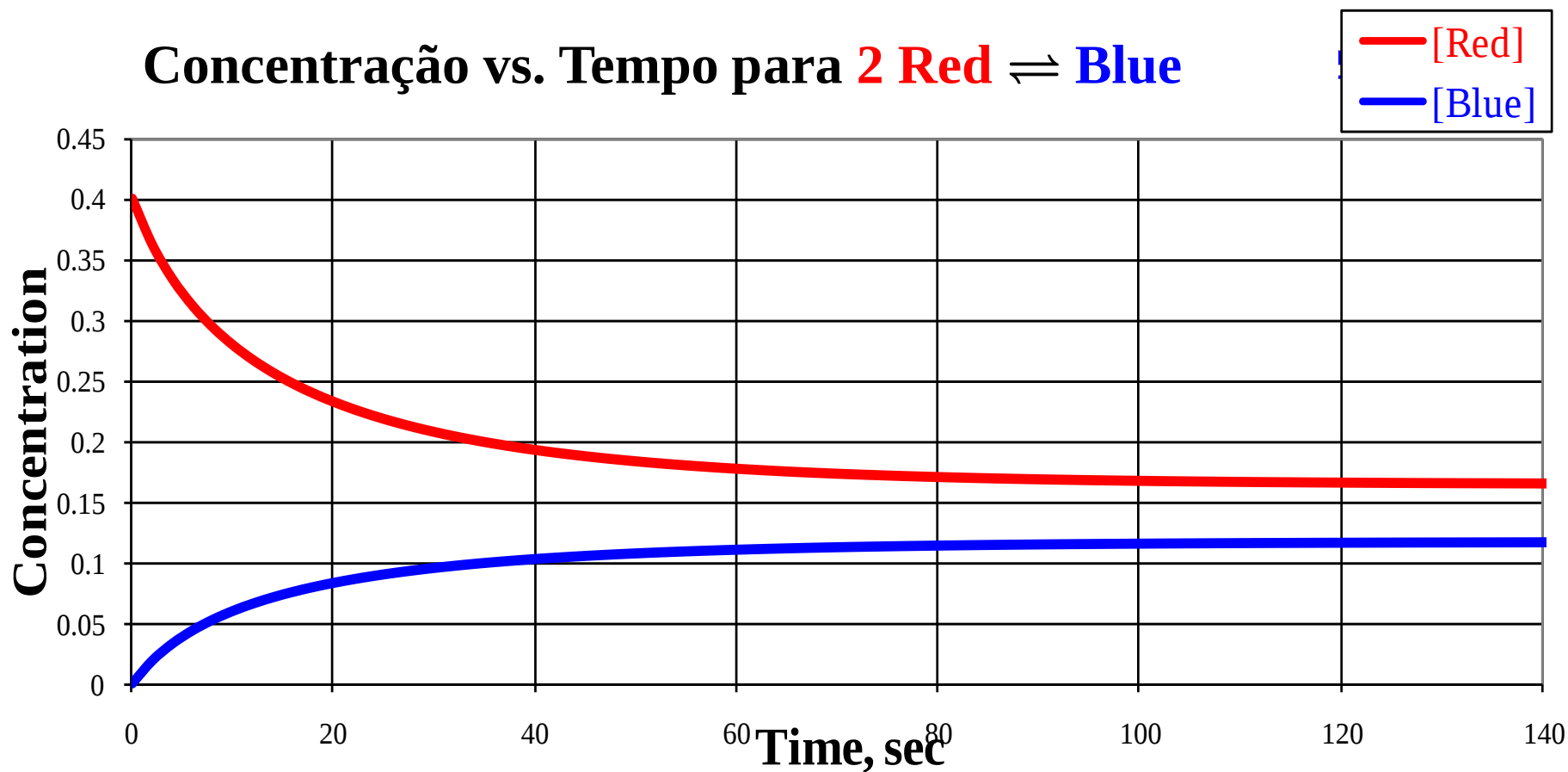
Note que equilíbrio **não** significa que as
concentrações são iguais!

Uma vez estabelecido o equilíbrio,
a velocidade de conversão de Red em
Blue é igual à velocidade da conversão
de Blue em Red

Reação Hipotética

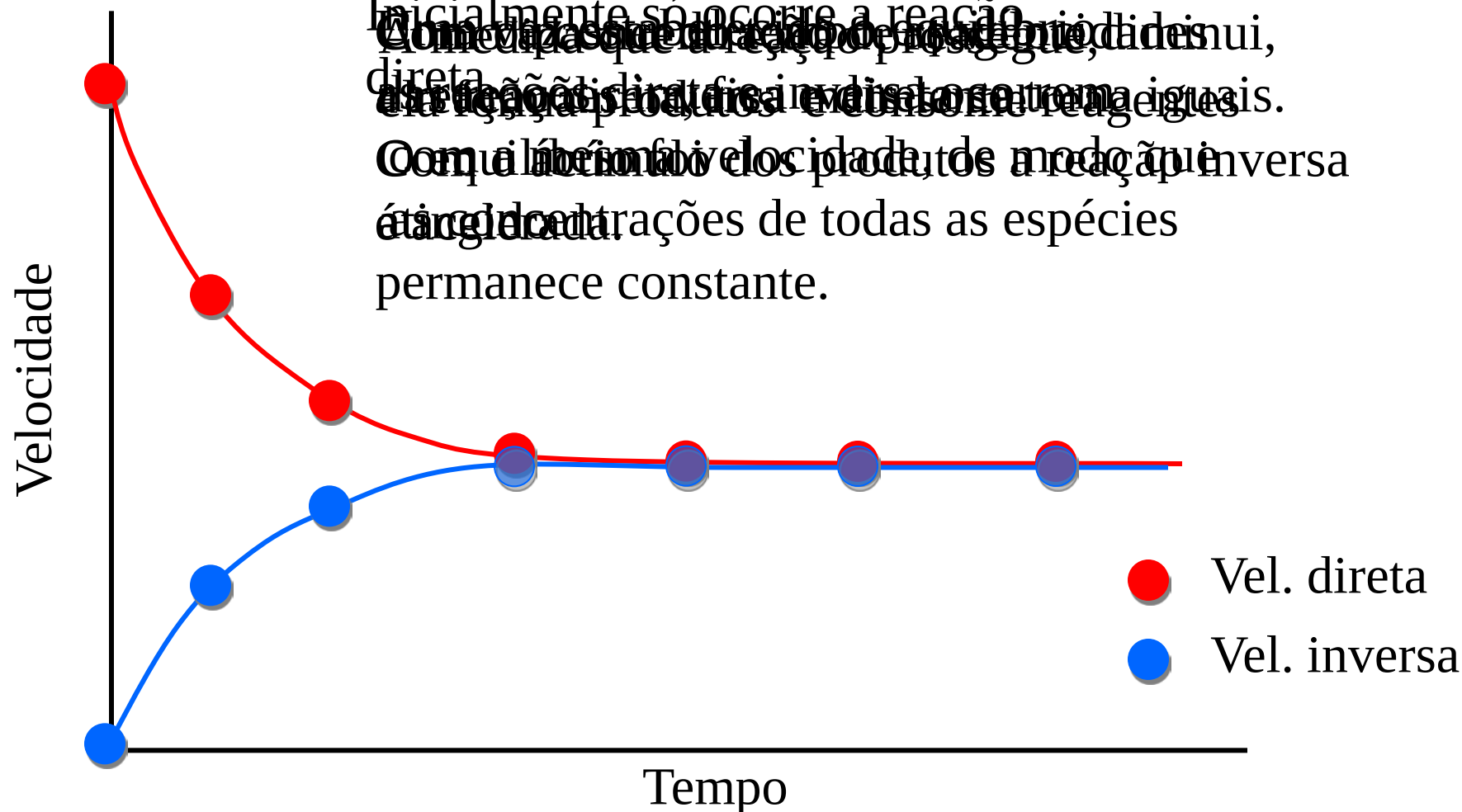


Concentração vs. Tempo para $2 \text{ Red} \rightleftharpoons \text{Blue}$



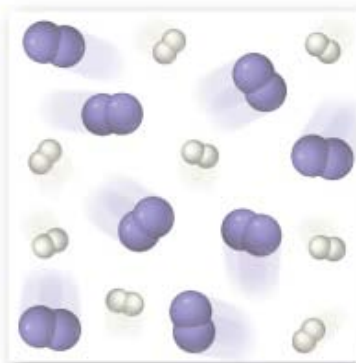
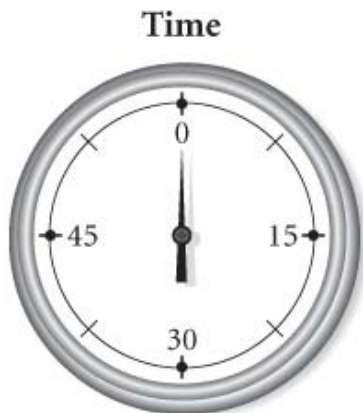
Dinâmica de Reação

Inicialmente só ocorre a reação direta, com a concentração de reagentes diminuindo e a concentração de produtos aumentando. Com o tempo as velocidades direta e inversa tornam-se iguais. Com a liberação dos produtos a reação inversa também ocorre, e a concentração de todas as espécies permanece constante.



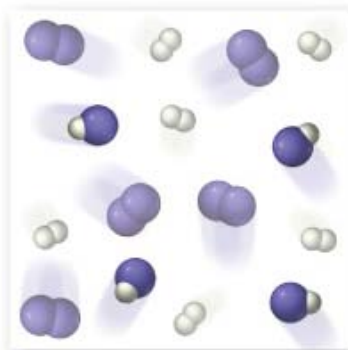
Equilíbrio Dinâmico

- à medida que a reação direta fica mais lenta e a inversa fica mais rápida, elas acabam atingindo a mesma velocidade
- **equilíbrio dinâmico** é a condição em que as velocidades das reações direta e inversa são iguais
- quando a reação atinge o equilíbrio, as concentrações de todas as espécies permanecem constantes
 - ✓ porque as espécies estão sendo consumidas e formadas com a mesma velocidade



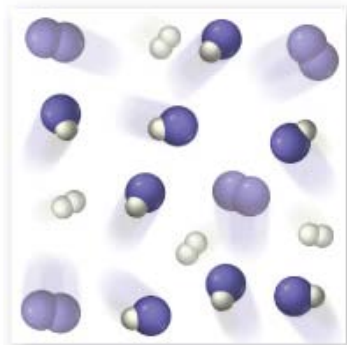
em $t = 0$, há somente reagentes na mistura, portanto apenas a reação direta pode ocorrer

$$[\text{H}_2] = 8, [\text{I}_2] = 8, [\text{HI}] = 0$$



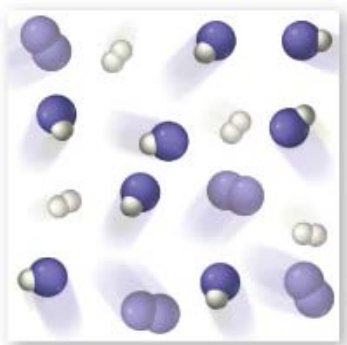
em $t = 16$, há tanto reagentes como produtos na mistura, portanto ambas as reações, direta e inversa, podem ocorrer

$$[\text{H}_2] = 6, [\text{I}_2] = 6, [\text{HI}] = 4$$



em $t = 32$, há mais produtos que reagentes na mistura – a reação direta fica mais lenta à medida que os reagentes se esgotam e a reação inversa é acelerada

$$[\text{H}_2] = 4, [\text{I}_2] = 4, [\text{HI}] = 8$$

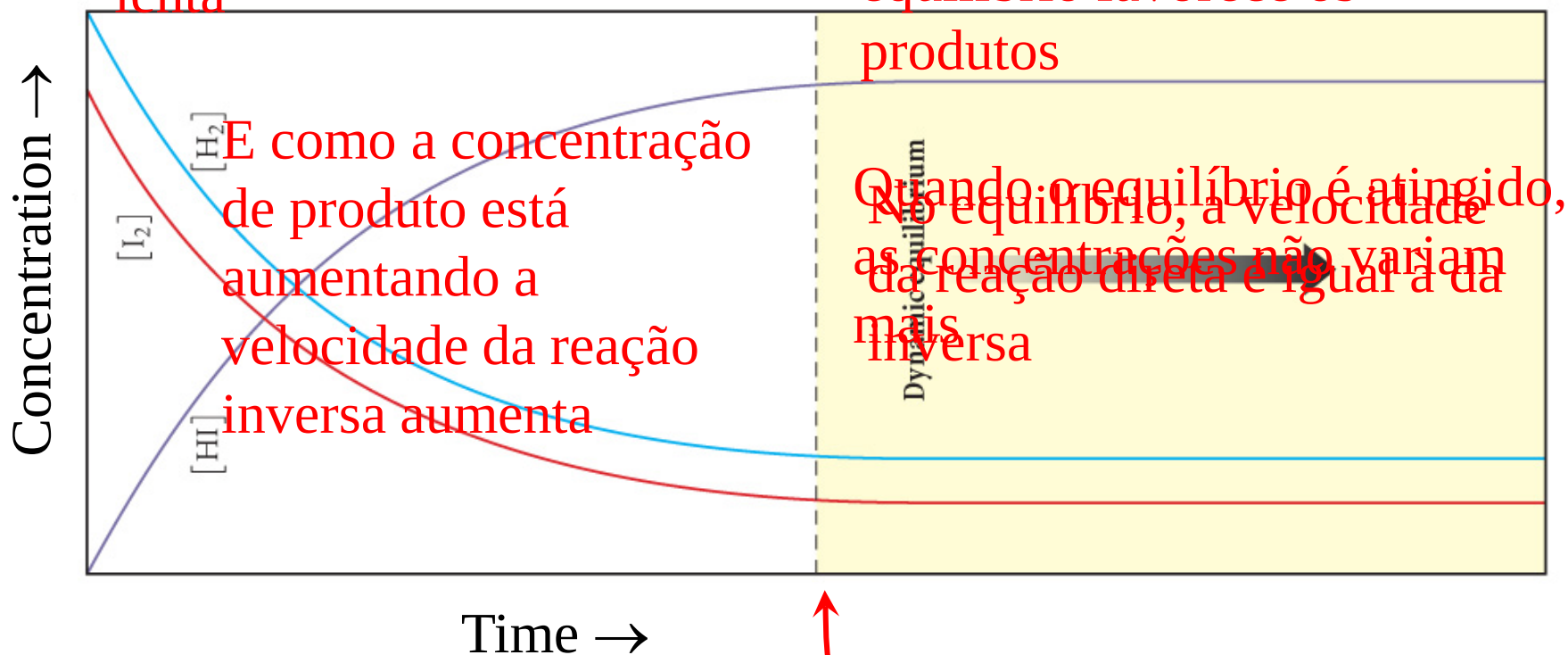


em $t = 48$, as quantias de produtos e reagentes na mistura não mudaram – as reações direta e inversa ocorrem à mesma velocidade – o equilíbrio foi atingido



Como as concentrações de reagentes estão diminuindo, segue, $[\text{H}_2]$ e $[\text{I}_2]$ a reação direta fica mais lenta
diminuem e $[\text{HI}]$ aumenta

Como $[\text{HI}]$ no equilíbrio é maior que $[\text{H}_2]$ ou $[\text{I}_2]$, dizemos que a posição de equilíbrio favorece os produtos



E como a concentração de produto está aumentando a velocidade da reação inversa aumenta

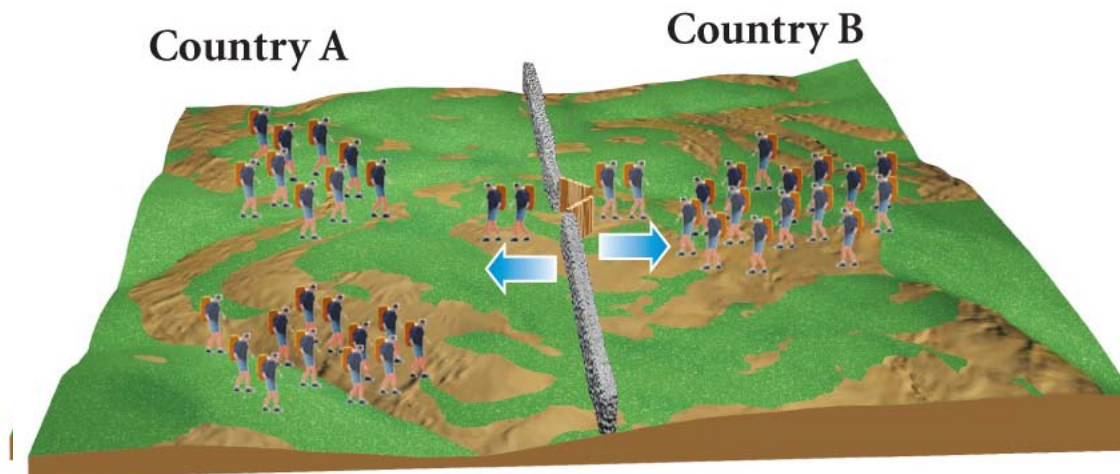
Quando o equilíbrio é atingido, as concentrações não variam mais

equilíbrio atingido

Equilíbrio $\neq$ Igual

- as velocidades das reações direta e inversa são iguais no equilíbrio
- mas isso não significa que as concentrações de reagentes e produtos são iguais
- algumas reações só atingem o equilíbrio depois que quase todos os reagentes são consumidos – dizemos que a posição de equilíbrio favorece os produtos
- outras reações atingem o equilíbrio quando apenas uma pequena fração das moléculas de reagente é consumida – dizemos que a posição de equilíbrio favorece os reagentes

Uma Analogia: Mudanças de População



Quando os cidadãos do país A acham que há superpopulação, eles migram para o país B. Porém, com o passar do tempo a migração irá ocorrer com a mesma taxa nas duas direções, levando a populações constantes, porém não necessariamente iguais, nos países A e B

Constante de Equilíbrio

- embora as concentrações de reagentes e produtos não sejam iguais no equilíbrio, há uma relação entre elas
- a relação entre a equação química e as concentrações de reagentes e produtos é chamada de **Expressão da Constante de Equilíbrio**
- para a equação geral $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$, a relação é dada abaixo:
 - ✓ as letras minúsculas representam os coeficientes da equação química balanceada
 - ✓ sempre produtos sobre reagentes
- **K** é chamada de **constante de equilíbrio**
 - ✓ adimensional

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

Escrevendo Expressões da Constante de Equilíbrio

- para a reação

- $aA_{(aq)} + bB_{(aq)} \rightleftharpoons cC_{(aq)} + dD_{(aq)}$
a expressão da constante de equilíbrio é

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

- portanto, para a reação



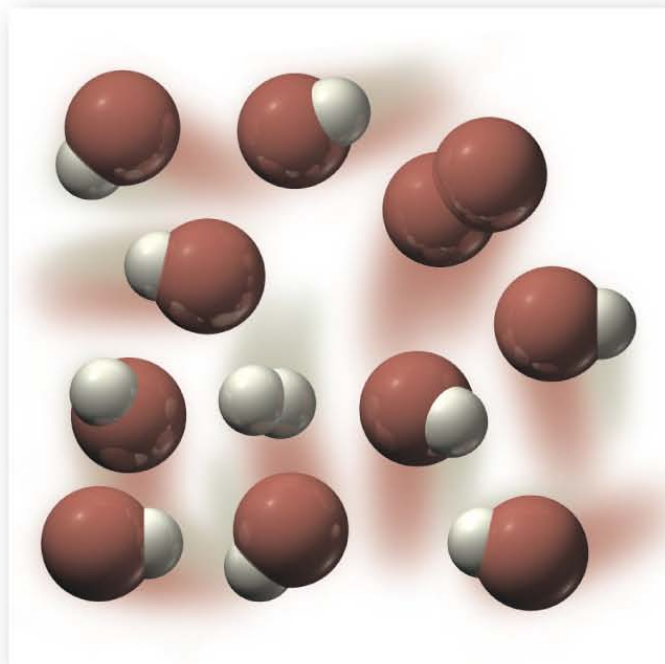
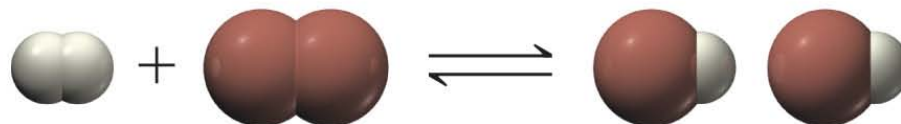
- a expressão da constante de equilíbrio é:

$$K = \frac{[\text{NO}_2]^4 \times [\text{O}_2]}{[\text{N}_2\text{O}_5]^2}$$

O Que Significa o Valor de K_{eq} ?

- quando $K_{eq} \gg 1$, sabemos que no equilíbrio haverá muito mais moléculas de produto do que de reagente
 - ✓ a posição de equilíbrio favorece os produtos
- quando $K_{eq} \ll 1$, sabemos que no equilíbrio haverá muito mais moléculas de reagente do que de produto
 - ✓ a posição de equilíbrio favorece os reagentes

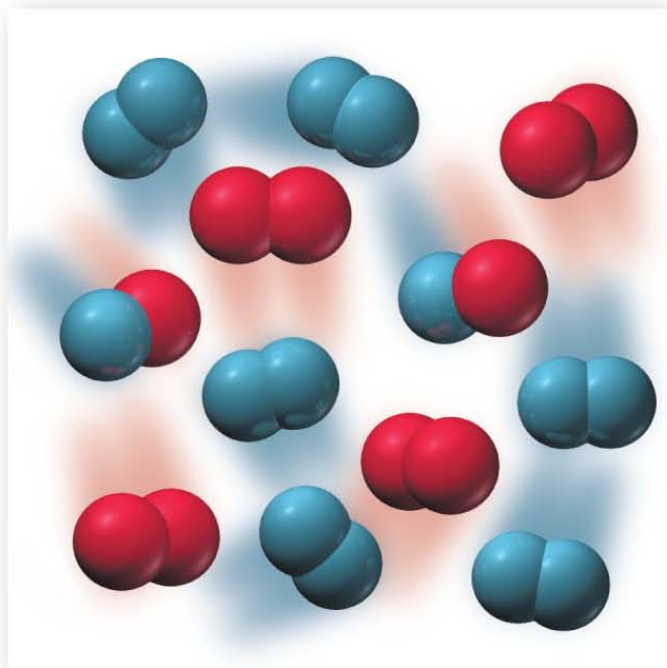
Uma Constante de Equilíbrio Grande



$$K = \frac{[\text{HBr}]^2}{[\text{H}_2][\text{Br}_2]} = \text{Número grande}$$

Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Uma Constante de Equilíbrio Pequena



$$K = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2][\text{O}_2]} = \text{Número pequeno}$$

Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Relações entre K e Equações Químicas

- Quando a equação é escrita de forma inversa, a constante é invertida

Na reação $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$
a expressão de K é:

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

Na reação $cC + dD \rightleftharpoons aA + bB$
a expressão de K é:

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

$$K_{\text{inversa}} = \frac{1}{K_{\text{direta}}}$$

Relações entre K e Equações Químicas

- Quando os coeficientes de uma equação são multiplicados por um fator, a constante de equilíbrio é elevada a esse fator

Na reação $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$
a expressão de K é :

$$K_{\text{original}} = \frac{[C]^c}{[A]^a \times [B]^b}$$

$$K_{\text{nova}} = K_{\text{original}}^n$$

Na reação $2aA + 2bB \rightleftharpoons 2cC$
a expressão de K é :

$$\begin{aligned} K_{\text{nova}} &= \frac{[C]^{2c}}{[A]^{2a} \times [B]^{2b}} \\ &= \left(\frac{[C]^c}{[A]^a \times [B]^b} \right)^2 \end{aligned}$$

Relações entre K e Equações Químicas

- Ao somar equações para obter uma nova equação, a constante de equilíbrio da nova equação é o produto das constantes de equilíbrio das equações originais

Para as reações (1) $aA \rightleftharpoons bB$ e (2) $bB \rightleftharpoons cC$ as expressões de K são:

$$K_1 = \frac{[B]^b}{[A]^a} \quad K_2 = \frac{[C]^c}{[B]^b}$$

$$K_{\text{nova}} = K_1 \times K_2$$

Para a reação $aA \rightleftharpoons cC$
A expressão de K é:

$$\begin{aligned} K_{\text{nova}} &= \frac{[C]^c}{[A]^a} \\ &= \frac{\cancel{[B]^b}}{[A]^a} \times \frac{[C]^c}{\cancel{[B]^b}} \end{aligned}$$

Exemplo – Determine K a 25°C para a reação
 $\text{NH}_3(g) \rightleftharpoons 0,5 \text{ N}_2(g) + 1,5 \text{ H}_2(g)$

Dados:	$\text{p/ } \text{N}_2(g) + 3 \text{ H}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{ NH}_3(g), K = 3,7 \times 10^8 \text{ a } 25^{\circ}\text{C}$
Encontre:	K para $\text{NH}_3(g) \rightleftharpoons 0,5\text{N}_2(g) + 1,5\text{H}_2(g)$, a 25°C
Plano conceitual:	K → K'
Relações:	$K_{\text{inversa}} = 1/K_{\text{direta}}, K_{\text{nova}} = K_{\text{original}}^n$
Solução: $\text{N}_2(g) + 3 \text{ H}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{ NH}_3(g)$ $2 \text{ NH}_3(g) \rightleftharpoons \text{N}_2(g) + 3 \text{ H}_2(g)$ $\text{NH}_3(g) \rightleftharpoons 0,5 \text{ N}_2(g) + 1,5 \text{ H}_2(g)$ $K_1 = 3,7 \times 10^8$ $K_2 = \frac{1}{K_1} = \frac{1}{3,7 \times 10^8}$ $K' = (K_2)^{1/2} = \left(\frac{1}{3,7 \times 10^8} \right)^{1/2}$ $K' = 5,2 \times 10^{-5}$	

Constantes de Equilíbrio p/ Reações Envolvendo Gases

- A concentração de um gás numa mistura é proporcional à sua pressão parcial
- Portanto, a constante de equilíbrio pode ser expressa como a razão entre as pressões parciais dos gases
- Para $aA(g) + bB(g) \rightleftharpoons cC(g) + dD(g)$ as expressões de K são

$$K_c = \frac{[C]^c \times [D]^d}{[A]^a \times [B]^b} \quad \text{ou} \quad K_p = \frac{P_C^c \times P_D^d}{P_A^a \times P_B^b}$$

K_c e K_p

- No cálculo de K_p , as pressões parciais são sempre expressas em atm
- Os valores de K_p e K_c não são necessariamente os mesmos
 - ✓ Por causa da diferença de unidades
 - ✓ $K_p = K_c$ quando $\Delta n = 0$
- A relação entre as duas é:

$$K_p = K_c \times (RT)^{\Delta n}$$

Δn é a diferença entre o número de mols de reagentes e de produtos

Derivando a Relação Entre K_p e K_c

$$[A] = \frac{n_A}{V}, \quad n_A = \text{mols de A}, \quad V = \text{volume de gás}$$

$$P_A V = n_A RT, \text{ da Lei dos Gases Ideais}$$

$$\text{substituindo: } P_A = \frac{n_A}{V} RT = [A]RT$$

$$\therefore [A] = \frac{P_A}{RT}$$

Derivando a Relação Entre K_p e K_c

$$[X] = \frac{P_X}{RT}$$

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

para $aA(g) + bB(g) \rightleftharpoons cC(g) + dD(g)$

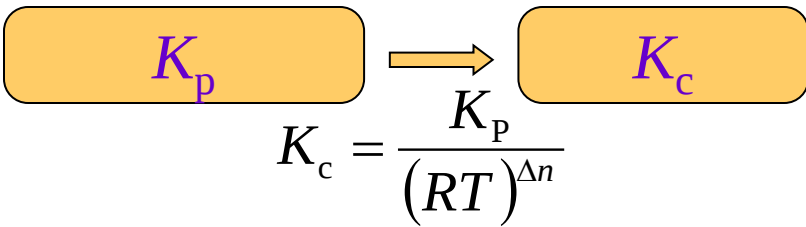
$$K_p = \frac{P_C^c \times P_D^d}{P_A^a \times P_B^b}$$

substituindo

$$K_c = \frac{\left(\frac{P_C}{RT}\right)^c \times \left(\frac{P_D}{RT}\right)^d}{\left(\frac{P_A}{RT}\right)^a \times \left(\frac{P_B}{RT}\right)^b} = \frac{P_C^c P_D^d \left(\frac{1}{RT}\right)^{c+d}}{P_A^a P_B^b \left(\frac{1}{RT}\right)^{a+b}} = K_p \left(\frac{1}{RT}\right)^{(c+d)-(a+b)}$$

$$\text{rearranjando: } K_p = K_c (RT)^{(c+d)-(a+b)} = K_c (RT)^{\Delta n}$$

Exemplo – Encontre K_c p/ a reação $2 \text{NO}(g) + \text{O}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{NO}_2(g)$,
 dado que $K_p = 2,2 \times 10^{12}$ a 25°C

Dado:	$K_p = 2,2 \times 10^{12}$
Encontre:	K_c
Plano:	 $K_c = \frac{K_p}{(RT)^{\Delta n}}$
Relações:	$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$
Solução:	$2 \text{NO}(g) + \text{O}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{NO}_2(g)$ $\Delta n = 2 - 3 = -1$ $K_c = \frac{K_p}{(RT)^{\Delta n}} = \frac{2,2 \times 10^{12}}{\left(0,08206 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \times 298 \text{ K}\right)^{-1}} = 5,4 \times 10^{13}$
Verifique:	K é um número adimensional Como há mais mols de reagente do que produto, K_c deveria ser maior que K_p, e é

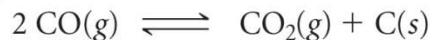
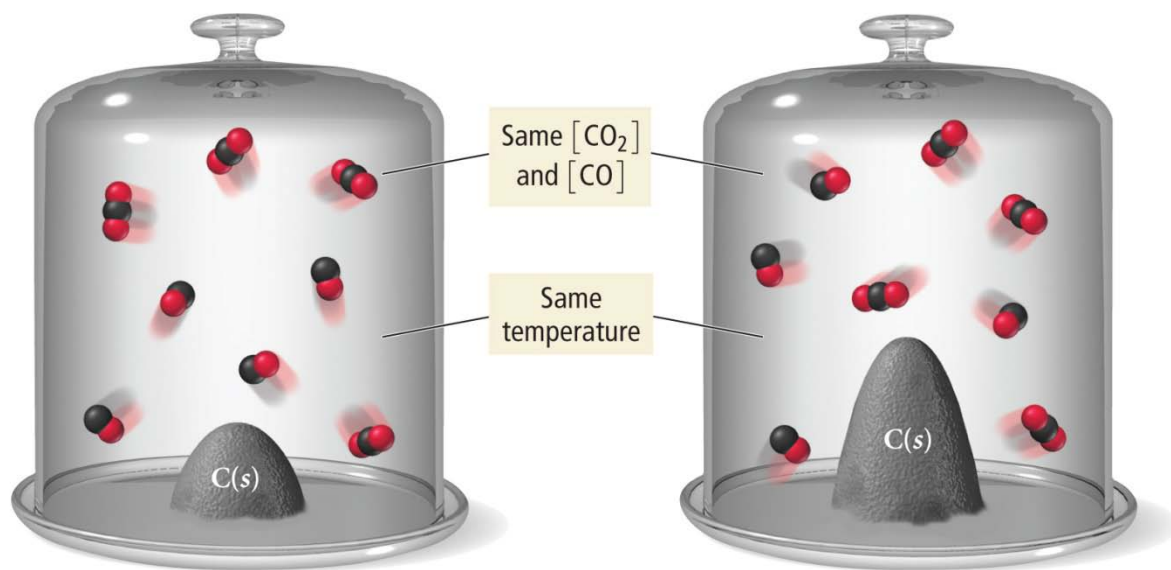
Equilíbrios Heterogêneos

- Sólidos puros e líquidos puros são materiais cuja concentração não varia durante uma reação
 - ✓ Sua quantia pode mudar, mas sua concentração em solução não varia
 - Por que não está em solução
- Já que suas concentrações não variam, sólidos e líquidos não são incluídos na expressão de K
- Para a reação $aA(s) + bB(aq) \rightleftharpoons cC(l) + dD(aq)$ a expressão de K é:

$$K_c = \frac{[D]^d}{[B]^b}$$

Equilíbrios Heterogêneos

A Heterogeneous Equilibrium



Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

A quantia de C é diferente, mas as quantias de CO e CO_2 permanecem iguais. Portanto a quantia de C não afeta a posição do equilíbrio.

$$K_c = \frac{[\text{CO}_2]}{[\text{CO}]^2}$$

$$K_p = \frac{P_{\text{CO}_2}}{P_{\text{CO}}^2}$$

Calculando Constantes de Equilíbrio a Partir de Constantes de Equilíbrio Medidas

- A forma mais direta de determinar K é medir as quantias de reagentes e produtos numa mistura em equilíbrio
 - ✓ Na verdade, você só precisa determinar uma quantia, e calcular as outras por estequiometria
- A mistura no equilíbrio pode ter quantias diferentes de produtos e reagentes, mas o valor de K sempre será o mesmo
 - ✓ Desde que a temperatura seja mantida constante
 - ✓ O valor da constante de equilíbrio é independente das quantias inicial e final de reagentes e produtos

Concentrações Inicial e de Equilíbrio Para

$$\text{H}_2(g) + \text{I}_2(g) \rightleftharpoons 2\text{HI}(g) \text{ a } 445^\circ\text{C}$$

Inicial			Equilíbrio			K
$[\text{H}_2]$	$[\text{I}_2]$	$[\text{HI}]$	$[\text{H}_2]$	$[\text{I}_2]$	$[\text{HI}]$	$K_{\text{eq}} = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]}$
0,50	0,50	0,0	0,11	0,11	0,78	$\frac{[0,78]^2}{[0,11][0,11]} = 50$
0,0	0,0	0,50	0,055	0,055	0,39	$\frac{[0,39]^2}{[0,055][0,055]} = 50$
0,50	0,50	0,50	0,165	0,165	1,17	$\frac{[1,17]^2}{[0,165][0,165]} = 50$
1,0	0,5	0,0	0,53	0,033	0,934	$\frac{[0,934]^2}{[0,53][0,033]} = 50$

Cálculo de Constantes de Equilíbrio

- A estequiometria pode ser usada p/ determinar K de todos os reagentes e produtos se você conhece as concentrações iniciais e uma das concentrações no equilíbrio
- Suponha que você tem a reação $2 A_{(aq)} + B_{(aq)} \rightleftharpoons 4 C_{(aq)}$ com concentrações iniciais $[A] = 1,00 \text{ mol/L}$, $[B] = 1,00 \text{ mol/L}$ e $[C] = 0$. Você determina a concentração de C no equilíbrio como sendo $[C] = 0,50 \text{ mol/L}$.

	[A]	[B]	[C]
Molaridade inicial	1,00	1,00	0
Variação de conc.	$-1/2(0,50)$	$-1/4(0,50)$	$+0,50$
Molaridade no equilíbrio	0,75	0,88	0,50

Exemplo – Encontre o valor de K_c para a reação
 $2 \text{CH}_4(g) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2(g) + 3 \text{H}_2(g)$ a 1700°C se $[\text{CH}_4]_{\text{inicial}} = 0,115 \text{ mol/L}$ e $[\text{C}_2\text{H}_2]_{\text{equilíbrio}} = 0,035 \text{ mol/L}$

Construa uma tabela IVE para a reação

Para a substância cuja $[\]_{\text{equilíbrio}}$ é conhecida, calcule a variação de concentração

	$[\text{CH}_4]$	$[\text{C}_2\text{H}_2]$	$[\text{H}_2]$
Inicial	0,115	0,000	0,000
Variação		+0,035	
Equilíbrio		0,035	

Exemplo – Encontre o valor de K_c para a reação
 $2 \text{CH}_4(g) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2(g) + 3 \text{H}_2(g)$ a 1700°C se $[\text{CH}_4]_{\text{inicial}} = 0,115 \text{ mol/L}$ e $[\text{C}_2\text{H}_2]_{\text{equilíbrio}} = 0,035 \text{ mol/L}$

use a variação conhecida p/ determinar a variação das outras espécies

Some a variação à concentração inicial, para encontra as concs. No equilíbrio em cada coluna

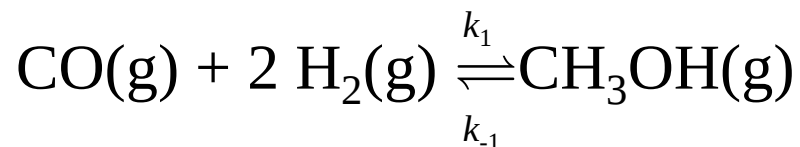
use as concs. N equilíbrio p/ calcular K_c

	$[\text{CH}_4]$	$[\text{C}_2\text{H}_2]$	$[\text{H}_2]$
inicial	0,115	0,000	0,000
variação	-2(0,035)	+0,035	+3(0,035)
equilíbrio	0,045	0,035	0,105

$$K_c = \frac{[\text{C}_2\text{H}_2][\text{H}_2]^3}{[\text{CH}_4]^2}$$

$$= \frac{(0,035)(0,105)^3}{(0,045)^2} = 0,020$$

O Quociente de Reação, Q : Previsão da Direção de uma Reação.



- Há várias formas de se atingir o equilíbrio.
- Necessita-se da determinação qualitativa das mudanças que ocorrem ao nos aproximarmos do equilíbrio.

$$Q_c = \frac{[\text{G}]_t^g [\text{H}]_t^h}{[\text{A}]_t^m [\text{B}]_t^n} \quad \text{No equilíbrio } Q_c = K_c$$

O Quociente de Reação, Q

Em geral, todos os sistemas químicos em reação são caracterizados por seu

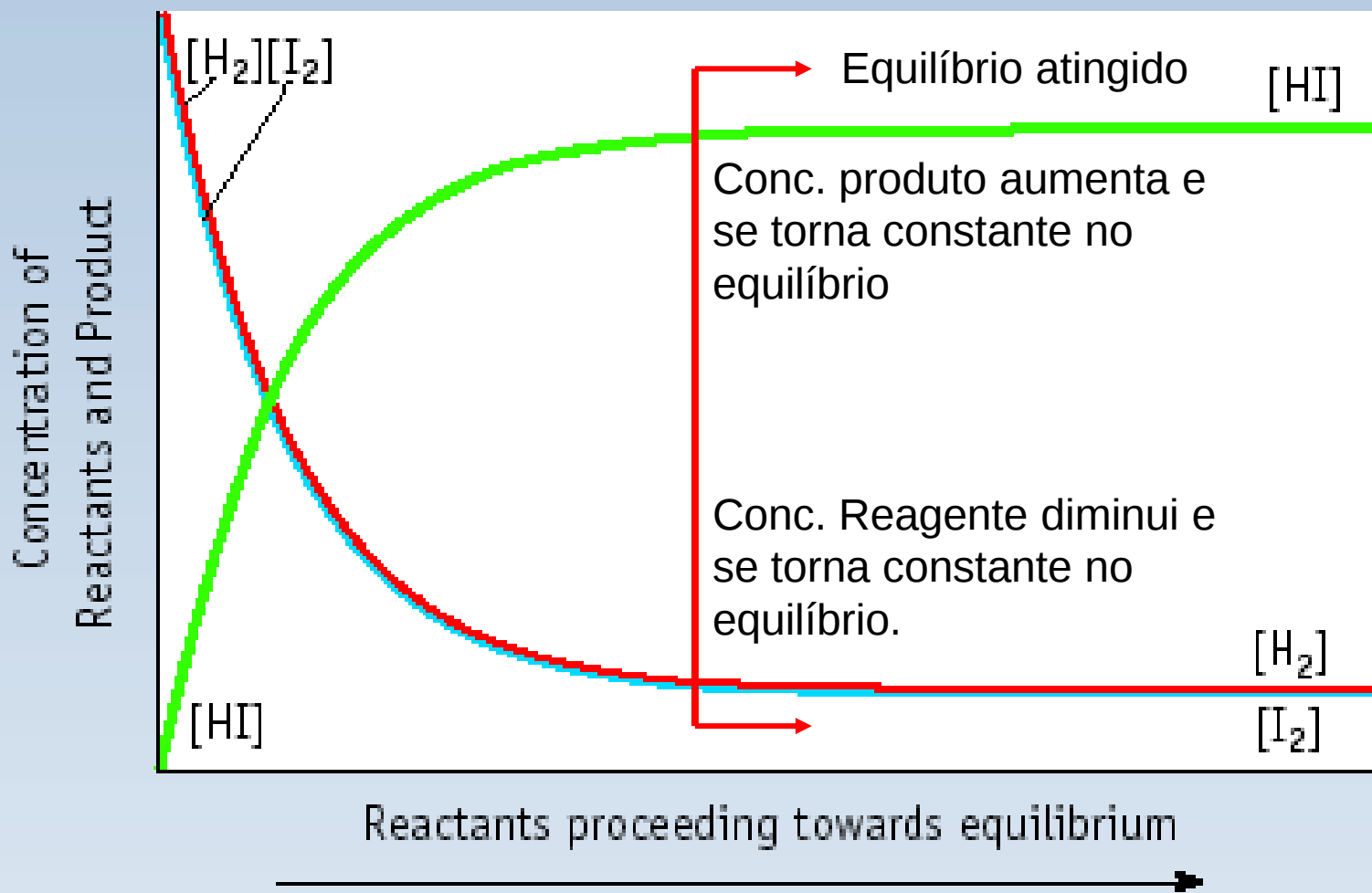
QUOCIENTE DE REAÇÃO, Q .

Sob Quaisquer condições:

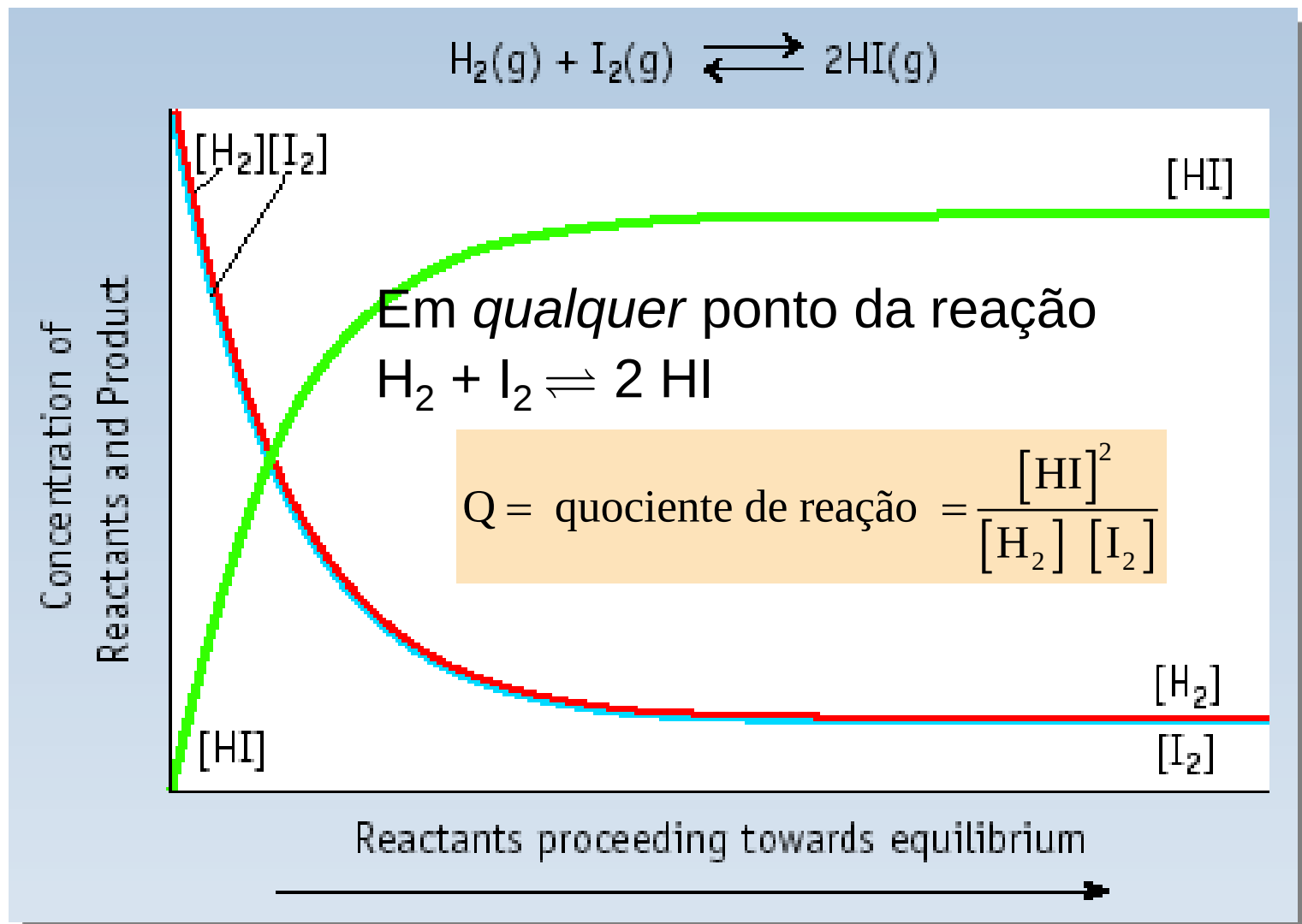
$$\text{Quociente de reação} = Q = \frac{\begin{array}{c} \text{Concentrações de Produtos} \\ [C]^c [D]^d \end{array}}{\begin{array}{c} [A]^a [B]^b \\ \text{Concentrações de reagentes} \end{array}}$$

Se $Q = K$, então o sistema está em equilíbrio.

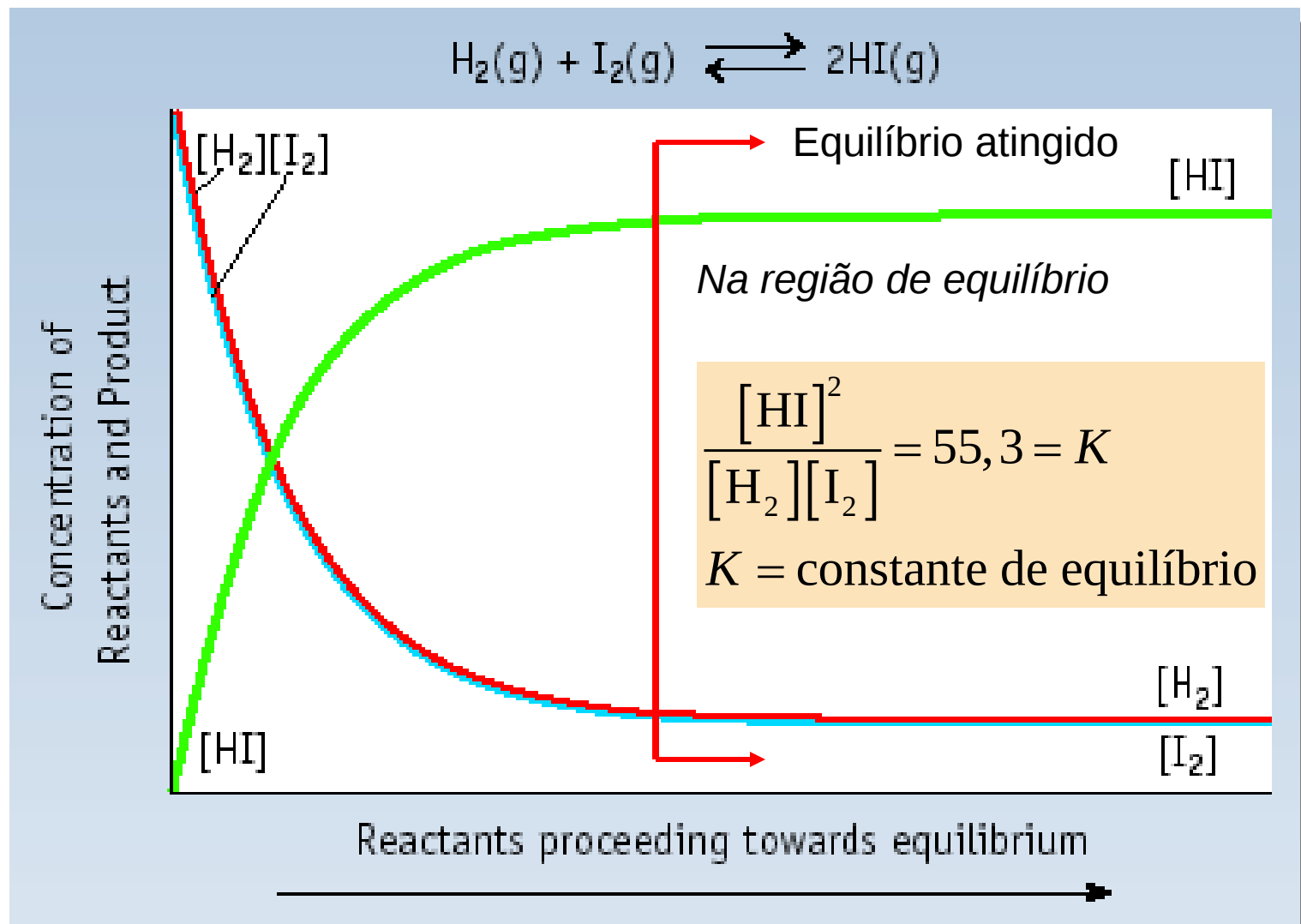
O Quociente de Reação, Q



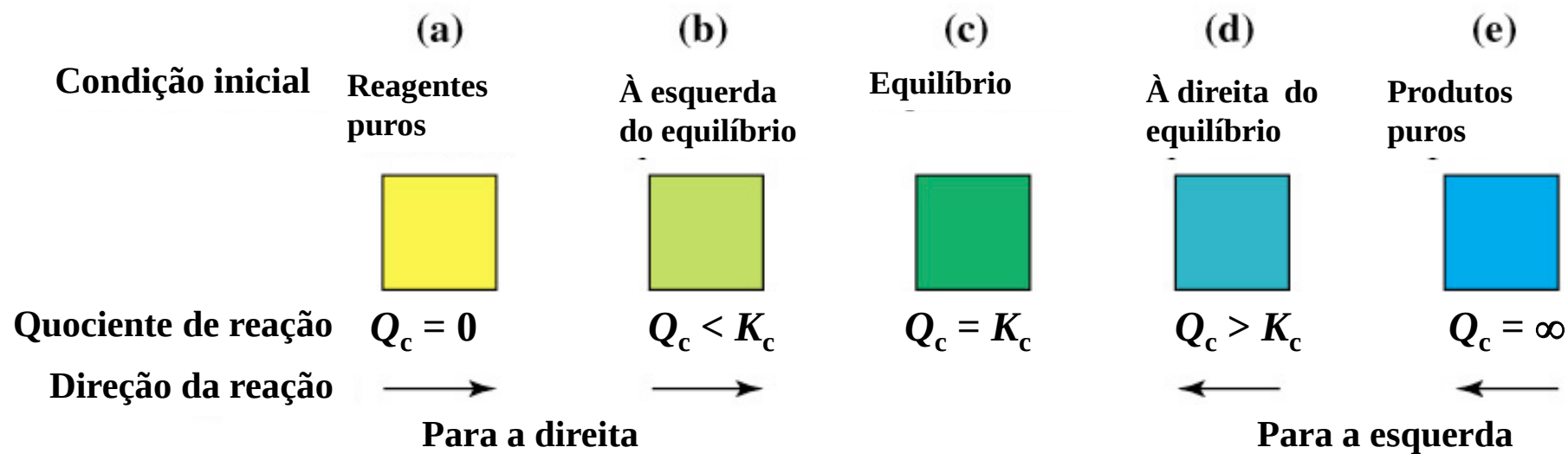
O Quociente de Reação, Q



O Quociente de Reação, Q



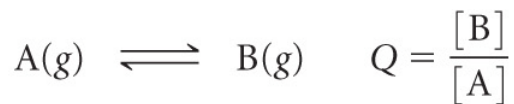
Quociente de Reação



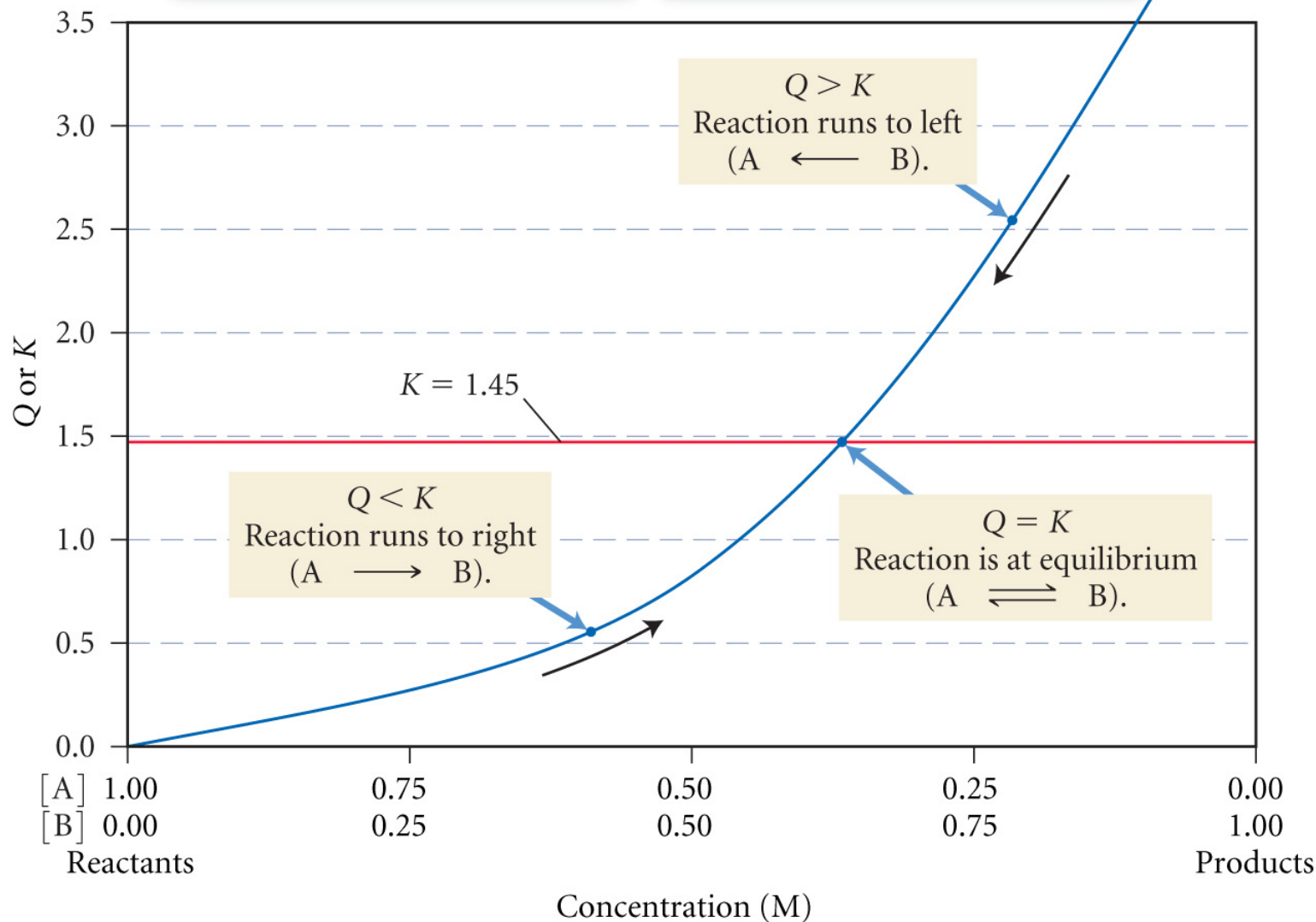
O Quociente de Reação: Prevendo a Direção da Variação

- Se $Q > K$, a reação será mais rápida na direção inversa
 - ✓ [produtos] irá diminuir e [reagentes] irá aumentar
- Se $Q < K$, a reação será mais rápida na direção direta
 - ✓ [produtos] irá aumentar e [reagentes] irá diminuir
- Se $Q = K$, a reação está em equilíbrio
 - ✓ Não haverá variação em [produtos] e [reagentes] não
- se uma mistura reacional contém só reagentes, $Q = 0$, e a reação segue na direção direta
- se uma mistura reacional contém só produtos, $Q = \infty$, e a reação segue na direção inversa

Q, K, e a Direção da Reação



$$Q \longrightarrow \infty \text{ at } [\text{A}] = 0, [\text{B}] = 1$$



Ex.: Qual será a direção da reação abaixo se $P_{I_2} = 0,114$ atm,
 $P_{Cl_2} = 0,102$ atm & $P_{ICl} = 0,355$ atm

Dado:	para $I_2(g) + Cl_2(g) \rightleftharpoons 2 ICl(g)$, $K_p = 81,9$
Encontre:	direção da reação
Plano:	$P_{I_2}, P_{Cl_2}, P_{ICl} \longrightarrow Q$
Relações:	Se $Q = K$, equilíbrio; Se $Q < K$, direta; Se $Q > K$, inversa
Solução: $I_2(g) + Cl_2(g) \rightleftharpoons 2 ICl(g) \quad K_p = 81,9$ $Q_p = \frac{P_{ICl}^2}{P_{I_2} \cdot P_{Cl_2}} = \frac{(0,355)^2}{(0,114) \times (0,102)}$ $Q_p = 10,8$ Como $Q (10,8) < K (81,9)$, a reação seguirá p/ a direita	

Ex.: Se $[\text{COF}_2]_{\text{eq}} = 0,255 \text{ M}$ e $[\text{CF}_4]_{\text{eq}} = 0,118 \text{ M}$, e $K_c = 2,00$
@ 1000°C , encontre $[\text{CO}_2]_{\text{eq}}$ para a reação dada.

Separe: Você tem a reação e K_c . Você também tem $[\text{X}]_{\text{eq}}$ de todos os reagentes, exceto um deles.	Dado: Encontre:	$2 \text{COF}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{CF}_4$ $[\text{COF}_2]_{\text{eq}} = 0,255 \text{ M}, [\text{CF}_4]_{\text{eq}} = 0,118 \text{ M}$ $[\text{CO}_2]_{\text{eq}}$
Estratégia: Você pode calcular a concentração que falta usando a expressão da constante de equilíbrio	Plano: Relações:	$K, [\text{COF}_2], [\text{CF}_4]$ $\longrightarrow$ $[\text{CO}_2]$ $K_c = \frac{[\text{CO}_2][\text{CF}_4]}{[\text{COF}_2]^2}$
Resolva: Resolva a expressão da constante de equilíbrio para a quantia desconhecida substituindo os quantias dadas	Solução:	$K_c = \frac{[\text{CO}_2][\text{CF}_4]}{[\text{COF}_2]^2}$ $[\text{CO}_2] = K_c \cdot \frac{[\text{COF}_2]^2}{[\text{CF}_4]}$ $= (2,00) \frac{(0,255)^2}{(0,118)} = 1,10 \text{ mol/L}$
Verifique:	Verifique:	Unidades & Magnitude OK

Uma amostra de $\text{PCl}_5(g)$ é colocada em um frasco de 0,500 L e aquecida a 160°C . O PCl_5 se decompõe em $\text{PCl}_3(g)$ e $\text{Cl}_2(g)$. No equilíbrio, formam-se 0,203 mol de PCl_3 e Cl_2 . Determine a concentração de PCl_5 no equilíbrio se $K_c = 0,0635$

Uma amostra de $\text{PCl}_5(g)$ é colocada em um frasco de 0,500 L e aquecida a 160°C . O PCl_5 se decompõe em $\text{PCl}_3(g)$ e $\text{Cl}_2(g)$. No equilíbrio, formam-se 0,203 mol de PCl_3 e Cl_2 . Determine a concentração de PCl_5 no equilíbrio se $K_c = 0,0635$



Conc. no equilíbrio, mol/L	?	$\frac{0,203 \text{ mol}}{0,500 \text{ L}}$	$\frac{0,203 \text{ mol}}{0,500 \text{ L}}$
-------------------------------	---	---	---

$$K_c = \frac{[\text{PCl}_3][\text{Cl}_2]}{[\text{PCl}_5]}$$

$$[\text{PCl}_5] = \frac{[\text{PCl}_3][\text{Cl}_2]}{K_c} = \frac{(0,406)(0,406)}{(0,0635)}$$

$$[\text{PCl}_5] = 2,60 \text{ mol/L}$$

Determinando as Concentrações no Equilíbrio a Partir de K e Concentrações ou Pressões Iniciais

- Decida primeiro para que lado vai a reação
 - ✓ compare Q a K
- defina as variações de todas as substâncias em termos de x
 - ✓ use o coeficiente da equação química para o coeficiente de x
 - ✓ a variação de x é **positiva** para substâncias que estão do lado favorecido pela reação
 - ✓ a variação de x é **negativa** para substâncias que estão do lado oposto ao favorecido pela reação
- resolva para x
 - ✓ para equações do 2o. grau, obtenha as raízes usando a fórmula quadrática
 - ✓ pode ser possível simplificar por aproximação quando K é muito grande ou muito pequeno

Para a reação $\text{I}_2(g) + \text{Cl}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{ICl}(g)$ a 25°C , $K_p = 81,9$. Se as pressões parciais iniciais são todas $0,100 \text{ atm}$, determine as concentrações no equilíbrio.

Construa uma tabela IVE para a reação

Determine a direção da reação

	$[\text{I}_2]$	$[\text{Cl}_2]$	$[\text{ICl}]$
inicial	0,100	0,100	0,100
variação			
equilíbrio			

$$Q_p = \frac{P_{\text{ICl}}^2}{P_{\text{I}_2} \times P_{\text{Cl}_2}} = \frac{(0,100)^2}{(0,100) \times (0,100)}$$

$$Q_p = 1$$

já que $Q_p(1) < K_p(81,9)$, a reação segue para a direita

Para a reação $\text{I}_2(g) + \text{Cl}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{ICl}(g)$ a 25°C , $K_p = 81,9$. Se as pressões parciais iniciais são todas $0,100 \text{ atm}$, determine as concentrações no equilíbrio.

represente a variação das pressões parciais em termos de x

some as colunas para encontrar as conc. de equilíbrio em termos de x

substitua na constante de equilíbrio e resolva para x

	$[\text{I}_2]$	$[\text{Cl}_2]$	$[\text{ICl}]$
inicial	0,100	0,100	0,100
variação	$-x$	$-x$	$+2x$
equilíbrio	$0,100-x$	$0,100-x$	$0,100+2x$

$$K_p = \frac{P_{\text{ICl}}^2}{P_{\text{I}_2} \times P_{\text{Cl}_2}}$$

$$81,9 = \frac{(0,100 + 2x)^2}{(0,100 - x) \times (0,100 - x)} = \frac{(0,100 + 2x)^2}{(0,100 - x)^2}$$

Para a reação $\text{I}_2(g) + \text{Cl}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{ICl}(g)$ a 25°C , $K_p = 81,9$. Se as pressões parciais iniciais são todas $0,100 \text{ atm}$, determine as concentrações no equilíbrio.

substitua na constante de equilíbrio e resolva para x

	$[\text{I}_2]$	$[\text{Cl}_2]$	$[\text{ICl}]$
inicial	0,100	0,100	0,100
variação	$-x$	$-x$	$+2x$
equilíbrio	$0,100-x$	$0,100-x$	$0,100+2x$

$$\sqrt{81,9} = \sqrt{\frac{(0,100 + 2x)^2}{(0,100 - x)^2}} = \frac{(0,100 + 2x)}{(0,100 - x)} \quad \sqrt{81,9}(0,100) - 0,100 = 2x + \sqrt{81,9}x$$

$$0,805 = 11,05x$$

$$0,0729 = x$$

$$\sqrt{81,9}(0,100 - x) = (0,100 + 2x)$$

$$\sqrt{81,9}(0,100) - \sqrt{81,9}(x) = (0,100 + 2x)$$

$$\sqrt{81,9}(0,100) - 0,100 = 2x + \sqrt{81,9}(x)$$

Para a reação $\text{I}_2(g) + \text{Cl}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{ICl}(g)$ a 25°C , $K_p = 81,9$. Se as pressões parciais iniciais são todas $0,100 \text{ atm}$, determine as concentrações no equilíbrio.

substitua x na expressão da cte. de equilíbrio e resolva

	$[\text{I}_2]$	$[\text{Cl}_2]$	$[\text{ICl}]$
inicial	0,100	0,100	0,100
variação	-0,0729	-0,0729	2(-0,0729)
equilíbrio	0,027	0,027	0,246

$$0,0729 = x$$

$$P_{\text{I}_2} = 0,100 - x = 0,100 - 0,0729 = 0,027 \text{ atm}$$

$$P_{\text{Cl}_2} = 0,100 - x = 0,100 - 0,0729 = 0,027 \text{ atm}$$

$$P_{\text{ICl}} = 0,100 + 2x = 0,100 + 2(0,0729) = 0,246 \text{ atm}$$

Para a reação $\text{I}_2(g) + \text{Cl}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{ICl}(g)$ a 25°C , $K_p = 81,9$. Se as pressões parciais iniciais são todas 0,100 atm, determine as concentrações no equilíbrio.

Verifique, substituindo as concentrações de equilíbrio na expressão de K e comparando o valor obtido com K dado

	$[\text{I}_2]$	$[\text{Cl}_2]$	$[\text{ICl}]$
inicial	0,100	0,100	0,100
variação	-0,0729	-0,0729	2(0,0729)
equilíbrio	0,027	0,027	0,246

$$K_p = \frac{P_{\text{ICl}}^2}{P_{\text{I}_2} \times P_{\text{Cl}_2}}$$

$$K_p = \frac{(0,246)^2}{(0,027) \times (0,027)} = 83$$

$K_p(\text{calculado}) = K_p(\text{dado})$ nos limites dos algarismos significativos

Para a reação $\text{I}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{I}(g)$ o valor de $K_c = 3,76 \times 10^{-5}$ a 1000 K. Se 1,00 mol de I_2 é colocado em um frasco de 2,00 L e aquecido, quais serão as concentrações de equilíbrio de $[\text{I}_2]$ e $[\text{I}]$?

(Você vai precisar da fórmula quadrática...)

Para a reação $\text{I}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{I}(g)$ o valor de $K_c = 3,76 \times 10^{-5}$ a 1000 K. Se 1,00 mol de I_2 é colocado em um frasco de 2,00 L e aquecido, quais serão as concentrações de equilíbrio de $[\text{I}_2]$ e $[\text{I}]$?

	$[\text{I}_2]$	$[\text{I}]$
inicial	0,500	0
variação	-x	+2x
equilíbrio	$0,500 - x$	$2x$

como $[\text{I}]_{\text{inicial}} = 0$, $Q = 0$ e a reação tem que ir para a direita

$$K_c = \frac{[\text{I}]^2}{[\text{I}_2]}$$

$$3,76 \times 10^{-5} = \frac{(2x)^2}{(0,500 - x)}$$

$$3,76 \times 10^{-5} (0,500 - x) = 4x^2$$

Para a reação $\text{I}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{I}(g)$ o valor de $K_c = 3,76 \times 10^{-5}$ a 1000 K. Se 1,00 mol de I_2 é colocado em um frasco de 2,00 L e aquecido, quais serão as concentrações de equilíbrio de $[\text{I}_2]$ e $[\text{I}]$?

	$[\text{I}_2]$	$[\text{I}]$
inicial	0,500	0
variação	-x	+2x
equilíbrio	0,500- x	2x

$$3,76 \times 10^{-5} (0,500 - x) = 4x^2$$

$$1,88 \times 10^{-5} - 3,76 \times 10^{-5} x = 4x^2$$

$$0 = 4x^2 + 3,76 \times 10^{-5} x - 1,88 \times 10^{-5}$$

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (\text{note que apenas uma raiz fará sentido})$$

$$x = \frac{-(3,76 \times 10^{-5}) \pm \sqrt{(3,76 \times 10^{-5})^2 - 4(4)(-1,88 \times 10^{-5})}}{2(4)}$$

$$x = 0,00216$$

Para a reação $\text{I}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{I}(g)$ o valor de $K_c = 3,76 \times 10^{-5}$ a 1000 K. Se 1,00 mol de I_2 é colocado em um frasco de 2,00 L e aquecido, quais serão as concentrações de equilíbrio de $[\text{I}_2]$ e $[\text{I}]$?

	$[\text{I}_2]$	$[\text{I}]$
inicial	0,500	0
variação	$-x$	$+2x$
equilíbrio	0,498	0,00432

$$x = 0,00216$$

$$0,500 - 0,00216 = 0,498$$

$$[\text{I}_2] = 0,498 \text{ mol/L}$$

$$2(0,00216) = 0,00432$$

$$[\text{I}] = 0,00432 \text{ mol/L}$$

$$\sqrt{K_c} = \frac{[\text{I}]^2}{[\text{I}_2]} = \frac{(0,00432)^2}{(0,498)} = 3,75 \times 10^{-5} \quad \text{👉}$$

Aproximações Para Simplificar as Contas

- quando a constante de equilíbrio é muito pequena, a posição de equilíbrio favorece os reagentes
- para concentrações iniciais de reagentes relativamente altas, a concentração de reagentes não varia significativamente quando se atinge o equilíbrio
 - ✓ $[X]_{\text{equilíbrio}} = ([X]_{\text{inicial}} - ax) \approx [X]_{\text{inicial}}$
 - a aproximação é que a concentração de reagente no equilíbrio é igual à concentração inicial
 - ✓ supondo-se que a reação esteja seguindo no sentido direto

Verificando e Refinando as Aproximações

- podemos checar nossa aproximação ao final, comparando o valor aproximado de x com a concentração inicial
- se o valor aproximado de x é menor que 5% da concentração inicial, a aproximação é válida

se $\frac{x \text{ aproximado}}{\text{concentração inicial}} \times 100\% < 5\%$ a aproximação é válida

Para a reação $2 \text{H}_2\text{S}(g) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2(g) + \text{S}_2(g)$ a 800°C , $K_c = 1,67 \times 10^{-7}$. Se um frasco de $0,500 \text{ L}$ contendo inicialmente $1,25 \times 10^{-4} \text{ mol}$ de H_2S é aquecido a 800°C , determine as concentrações no equilíbrio.

Construa uma tabela IVE para a reação

Determine a direção da reação

	$[\text{H}_2\text{S}]$	$[\text{H}_2]$	$[\text{S}_2]$
inicial	$2,50 \times 10^{-4}$	0	0
variação			
equilíbrio			

Como não há produtos no início, $Q_c = 0$, e a reação vai no sentido direto

Para a reação $2 \text{H}_2\text{S}(g) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2(g) + \text{S}_2(g)$ a 800°C , $K_c = 1,67 \times 10^{-7}$. Se um frasco de $0,500 \text{ L}$ contendo inicialmente $1,25 \times 10^{-4} \text{ mol}$ de H_2S é aquecido a 800°C , determine as concentrações no equilíbrio.

represente a variação das pressões parciais em termos de x

some as colunas para encontrar as conc. de equilíbrio em termos de x

substitua na constante de equilíbrio e resolva para x

	$[\text{H}_2\text{S}]$	$[\text{H}_2]$	$[\text{S}_2]$
inicial	$2,50 \times 10^{-4}$	0	0
variação	$-2x$	$+2x$	$+x$
equilíbrio	$2,50 \times 10^{-4} - 2x$	$2x$	x

$$K_c = \frac{[\text{H}_2]^2 [\text{S}_2]}{[\text{H}_2\text{S}]^2} = \frac{(2x)^2 (x)}{(2,50 \times 10^{-4} - 2x)^2}$$

Para a reação $2 \text{H}_2\text{S}(g) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2(g) + \text{S}_2(g)$ a 800°C , $K_c = 1,67 \times 10^{-7}$. Se um frasco de $0,500 \text{ L}$ contendo inicialmente $1,25 \times 10^{-4} \text{ mol}$ de H_2S é aquecido a 800°C , determine as concentrações no equilíbrio.

Como K_c é muito pequeno, approxime $[\text{H}_2\text{S}]_{\text{eq}} = [\text{H}_2\text{S}]_{\text{inic}}$ e resolva para x

	$[\text{H}_2\text{S}]$	$[\text{H}_2]$	$[\text{S}_2]$
inicial	$2,50 \times 10^{-4}$	0	0
variação	$-2x$	$+2x$	$+x$
equilíbrio	$2,50 \times 10^{-4} - 2x$	$2x$	x

$$K_c = \frac{[\text{H}_2]^2 [\text{S}_2]}{[\text{H}_2\text{S}]^2} = \frac{(2x)^2 (x)}{(2,50 \times 10^{-4} - 2x)^2} = \sqrt[3]{\frac{(1,67 \times 10^{-7})(6,25 \times 10^{-8})}{4}}$$

$$1,67 \times 10^{-7} = \frac{4x^3}{6,25 \times 10^{-8}}$$

$$x = 1,38 \times 10^{-5}$$

Para a reação $2 \text{H}_2\text{S}(g) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2(g) + \text{S}_2(g)$ a 800°C , $K_c = 1,67 \times 10^{-7}$. Se um frasco de $0,500 \text{ L}$ contendo inicialmente $1,25 \times 10^{-4} \text{ mol}$ de H_2S é aquecido a 800°C , determine as concentrações no equilíbrio.

verifique se a aproximação é válida se $x < 5\%$ de $[\text{H}_2\text{S}]_{\text{inic}}$

	$[\text{H}_2\text{S}]$	$[\text{H}_2]$	$[\text{S}_2]$
inicial	$2,50 \times 10^{-4}$	0	0
variação	$-2x$	$+2x$	$+x$
equilíbrio	$2,50 \times 10^{-4}$	$2x$	x

$$\frac{1,38 \times 10^{-5}}{2,50 \times 10^{-4}} \times 100\% = 5,52\% > 5\%$$

a aproximação não é válida!!

Para a reação $2 \text{H}_2\text{S}(g) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2(g) + \text{S}_2(g)$ a 800°C , $K_c = 1,67 \times 10^{-7}$. Se um frasco de $0,500 \text{ L}$ contendo inicialmente $1,25 \times 10^{-4} \text{ mol}$ de H_2S é aquecido a 800°C , determine as concentrações no equilíbrio.

se a aprox. não é válida, substitua x_{aprox} em K_c onde ele é subtraído e resolva novamente para obter x_{novo}

	$[\text{H}_2\text{S}]$	$[\text{H}_2]$	$[\text{S}_2]$
inicial	$2,50 \times 10^{-4}$	0	0
variação	$-2x$	$+2x$	$+x$
equilíbrio	$2,50 \times 10^{-4} - 2x$	$2x$	x

$$x_{\text{aprox}} = 1,38 \times 10^{-5}$$

$$K_c = \frac{[\text{H}_2]^2 [\text{S}_2]}{[\text{H}_2\text{S}]^2} = \frac{(2x)^2 (x)}{(2,50 \times 10^{-4} - 2x)^2} = 1,67 \times 10^{-7}$$

$$1,67 \times 10^{-7} = \frac{4x^3}{(2,22 \times 10^{-4})^2} \quad x = 1,27 \times 10^{-5}$$

Para a reação $2 \text{H}_2\text{S}(g) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2(g) + \text{S}_2(g)$ a 800°C , $K_c = 1,67 \times 10^{-7}$. Se um frasco de $0,500 \text{ L}$ contendo inicialmente $1,25 \times 10^{-4} \text{ mol}$ de H_2S é aquecido a 800°C , determine as concentrações no equilíbrio.

Substitua x_{aprox} em K_c onde ele é substituído e resolva novamente para obter x_{novo} . Se x_{novo} for o mesmo número, você chegou à melhor aproximação.

	$[\text{H}_2\text{S}]$	$[\text{H}_2]$	$[\text{S}_2]$
inicial	$2,50 \times 10^{-4}$	0	0
variação	$-2x$	$+2x$	$+x$
equilíbrio	$2,50 \times 10^{-4} - 2x$	$2x$	x

$$x_{\text{aprox}} = 1,27 \times 10^{-5}$$

$$K_c = \frac{[\text{H}_2]^2 [\text{S}_2] (2x)^2 (x)(2x)^2 (x)}{(2,50 \times 10^{-4} - 2x)^2 (2x)^2 (x)} = \frac{(1,67 \times 10^{-7})(2,25 \times 10^{-4})^2}{4}$$

$$1,67 \times 10^{-7} = \frac{4x^3}{(2,25 \times 10^{-4})^2}$$

$$x = 1,28 \times 10^{-5}$$

como $x_{\text{aprox}} = x_{\text{novo}}$, approx. OK

Para a reação $2 \text{H}_2\text{S}(g) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2(g) + \text{S}_2(g)$ a 800°C , $K_c = 1,67 \times 10^{-7}$. Se um frasco de $0,500 \text{ L}$ contendo inicialmente $1,25 \times 10^{-4} \text{ mol}$ de H_2S é aquecido a 800°C , determine as concentrações no equilíbrio.

substitua $x_{\text{nov}}o$ nas concentrações de equilíbrio e resolva

	$[\text{H}_2\text{S}]$	$[\text{H}_2]$	$[\text{S}_2]$
inicial	$2,50 \times 10^{-4}$	0	0
variação	$-2x$	$+2x$	$+x$
equilíbrio	$2,50 \times 10^{-4}$ $-2x$	$2,56 \times 10^{-5}$	$1,28 \times 10^{-5}$

$$x_{\text{nov}}o = 1,28 \times 10^{-5}$$

$$[\text{H}_2\text{S}] = 2,50 \times 10^{-4} - 2x = 2,50 \times 10^{-4} - 2(1,28 \times 10^{-5}) = 2,24 \times 10^{-4} \text{ M}$$

$$[\text{H}_2] = 2x = 2(1,28 \times 10^{-5}) = 2,56 \times 10^{-5} \text{ M}$$

$$[\text{S}_2] = x = 1,28 \times 10^{-5} \text{ M}$$

Para a reação $2 \text{H}_2\text{S}(g) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2(g) + \text{S}_2(g)$ a 800°C , $K_c = 1,67 \times 10^{-7}$. Se um frasco de $0,500 \text{ L}$ contendo inicialmente $1,25 \times 10^{-4} \text{ mol}$ de H_2S é aquecido a 800°C , determine as concentrações no equilíbrio.

verifique, substituindo as concentrações de equilíbrio na expressão de K e comparando o K calculado ao K dado

	$[\text{H}_2\text{S}]$	$[\text{H}_2]$	$[\text{S}_2]$
inicial	$2,50 \times 10^{-4}$	0	0
variação	$-2x$	$+2x$	$+x$
equilíbrio	$2,24 \times 10^{-4}$	$2,56 \times 10^{-5}$	$1,28 \times 10^{-5}$

$$K_c = \frac{[\text{H}_2]^2 [\text{S}_2]}{[\text{H}_2\text{S}]^2} = \frac{(2,56 \times 10^{-5})^2 (1,28 \times 10^{-5})}{(2,24 \times 10^{-4})^2} = 1,67 \times 10^{-7}$$

$K_c(\text{calculado}) = K_c(\text{dado})$ considerando-se os algarismos significativos

Para a reação $\text{I}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{I}(g)$ o valor de $K_c = 3,76 \times 10^{-5}$ a 1000 K. Se 1,00 mol de I_2 é colocado em um frasco de 200 L e aquecido, quais serão as concentrações de $[\text{I}_2]$ e $[\text{I}]$ no equilíbrio? (use a aproximação para resolver para x)

Para a reação $\text{I}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{I}(g)$ o valor de $K_c = 3,76 \times 10^{-5}$ a 1000 K. Se 1,00 mol de I_2 é colocado em um frasco de 200 L e aquecido, quais serão as concentrações de $[\text{I}_2]$ e $[\text{I}]$ no equilíbrio?

	$[\text{I}_2]$	$[\text{I}]$
inicial	0,500	0
variação	-x	+2x
equilíbrio	0,500- x	2x

como $[\text{I}]_{\text{inicial}} = 0$, $Q = 0$ e a reação tem que prosseguir no sentido direto

$$K_c = \frac{[\text{I}]^2}{[\text{I}_2]}$$

$$3,76 \times 10^{-5} = \frac{(2x)^2}{(0,500 - x)} = \frac{(2x)^2}{(0,500)}$$

$$3,76 \times 10^{-5} (0,500) = 4x^2$$

Para a reação $\text{I}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{I}(g)$ o valor de $K_c = 3,76 \times 10^{-5}$ a 1000 K. Se 1,00 mol de I_2 é colocado em um frasco de 200 L e aquecido, quais serão as concentrações de $[\text{I}_2]$ e $[\text{I}]$ no equilíbrio?

	$[\text{I}_2]$	$[\text{I}]$
inicial	0.500	0
variação	$-x$	$+2x$
equilíbrio	$0,500 - x$	$2x$

$$3,76 \times 10^{-5} (0,500) = 4x^2 \quad \frac{2,17 \times 10^{-3}}{0,500} \times 100\% = 0,434\% < 5\%$$

$$1,88 \times 10^{-5} = 4x^2$$

$$\sqrt{\frac{1,88 \times 10^{-5}}{4}} = x = 2,17 \times 10^{-3}$$

a aproximação é válida!!

Para a reação $\text{I}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{I}(g)$ o valor de $K_c = 3,76 \times 10^{-5}$ a 1000 K. Se 1,00 mol de I_2 é colocado em um frasco de 200 L e aquecido, quais serão as concentrações de $[\text{I}_2]$ e $[\text{I}]$ no equilíbrio?

	$[\text{I}_2]$	$[\text{I}]$
inicial	0,500	0
variação	-x	+2x
equilíbrio	0,500- x	2x

$$0,500 - 0,00217 = 0,498$$

$$[\text{I}_2] = 0,498 \text{ M}$$

$$2(0,00217) = 0,00434$$

$$[\text{I}] = 0,00434 \text{ M}$$

$$x = 0,00217$$

$$\sqrt{K_c} = \frac{[\text{I}]^2}{[\text{I}_2]} = \frac{(0,00434)^2}{(0,498)} = 3,78 \times 10^{-5} \quad \text{✎}$$

Perturbando e Restabelecendo o Equilíbrio

- uma vez atingido o equilíbrio, as concentrações de todos os reagentes e produtos permanecem as mesmas
- porém, se as condições são alteradas, as concentrações de todas as espécies irão variar até que o equilíbrio se restabeleça.
- as novas concentrações serão diferentes, mas a constante de equilíbrio será a mesma
 - ✓ a menos que se mude a temperatura

Efeito das Variações de Concentração no Equilíbrio

- A adição de reagente irá diminuir as quantias dos outros reagentes e aumentar as quantias dos produtos até que uma nova posição de equilíbrio seja atingida
 - ✓ tendo o mesmo valor de K
- A remoção de produto aumentará as quantias dos outros produtos e diminuirá as quantias dos reagentes.
 - ✓ isso pode ser usado para levar uma reação ao seu final!
- **o equilíbrio se desloca para o lado que teve as espécies removidas**
- Lembre-se que a adição de mais sólido ou líquido não varia sua concentração – e portanto não afeta o equilíbrio.

Perturbando o Equilíbrio: Adição ou Remoção de Reagentes

- Restabelecido o equilíbrio, como é que a adição de um reagente irá afetar a velocidade da reação direta? E da reação inversa? O que isso causará? Como isso afetará o valor de K ? O Rogério Ceni fará mais quantos gols no Corinthians?
 - ✓ desde que o reagente faça parte da expressão de K
 - ou seja, não é um sólido ou líquido
- Restabelecido o equilíbrio, como é que a remoção de um reagente irá afetar a velocidade da reação direta? E da reação inversa? O que isso causará? Como isso afetará o valor de K ? O Luis Fabiano será artilheiro do Campeonato Brasileiro?

Perturbando o Equilíbrio: Adição de Reagentes

- a adição de um reagente inicialmente aumenta a velocidade da reação direta, mas não tem efeito na velocidade da reação inversa.
- a reação segue para a direita até o equilíbrio ser restabelecido.
- na nova posição de equilíbrio, as concentrações de reagentes e produtos serão diferentes do que se tinha antes da adição, mas serão tais que o valor da constante de equilíbrio permanece a mesma.

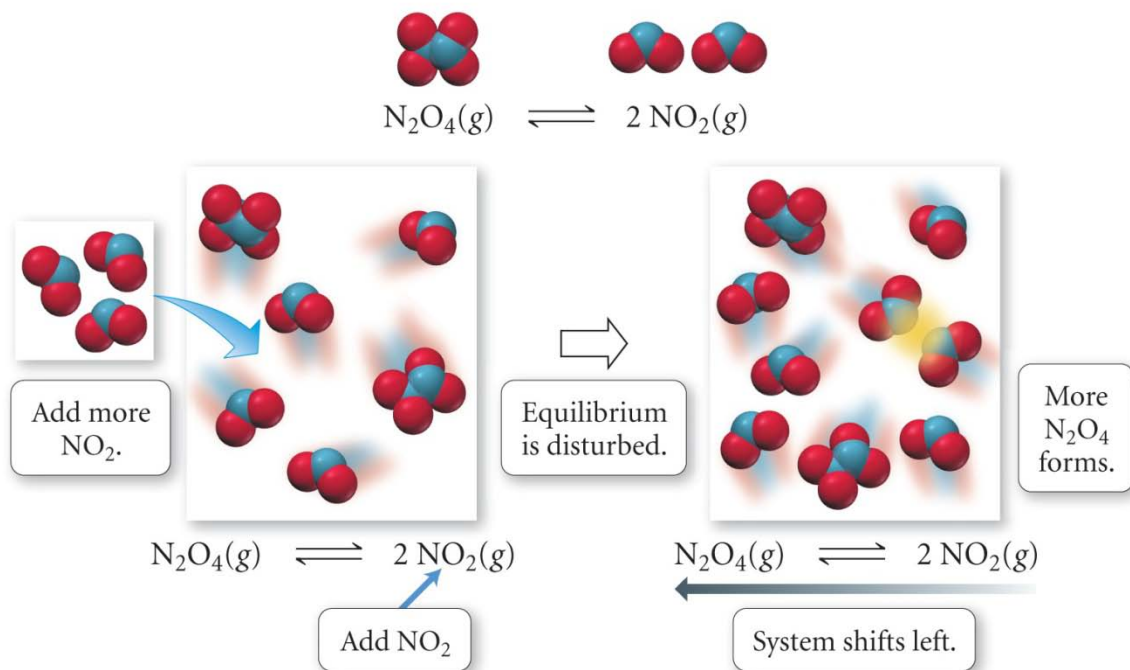
Perturbando o Equilíbrio: Removendo Reagentes

- a remoção de um reagente inicialmente diminuirá a velocidade da reação direta e aumentará a velocidade da reação inversa.
- a reação segue para a esquerda até que o equilíbrio seja restabelecido.
- na nova posição de equilíbrio, as concentrações de reagentes e produtos serão diferentes do que se tinha antes da adição, mas serão tais que o valor da constante de equilíbrio permanece a mesma.

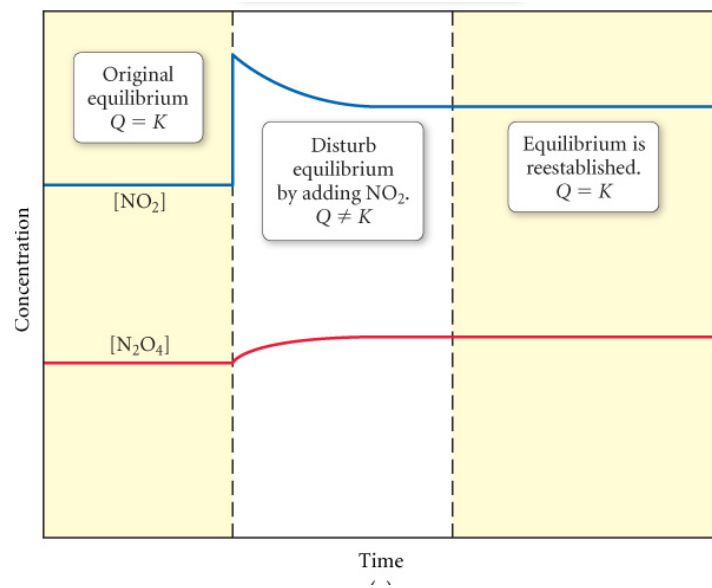
O Efeito da Adição de um Gás a uma Reação em Fase Gasosa no Equilíbrio

- a adição de um reagente gasoso aumenta sua pressão parcial, deslocando o equilíbrio p/ a direita
 - ✓ o aumento da pressão parcial aumenta sua concentração
 - ✓ não aumenta a pressão parcial dos outros gases na mistura
- a adição de um gás inerte não afeta o equilíbrio
 - ✓ pois não afeta as pressões parciais dos gases na reação.

O Efeito das Variações de Concentração no Equilíbrio

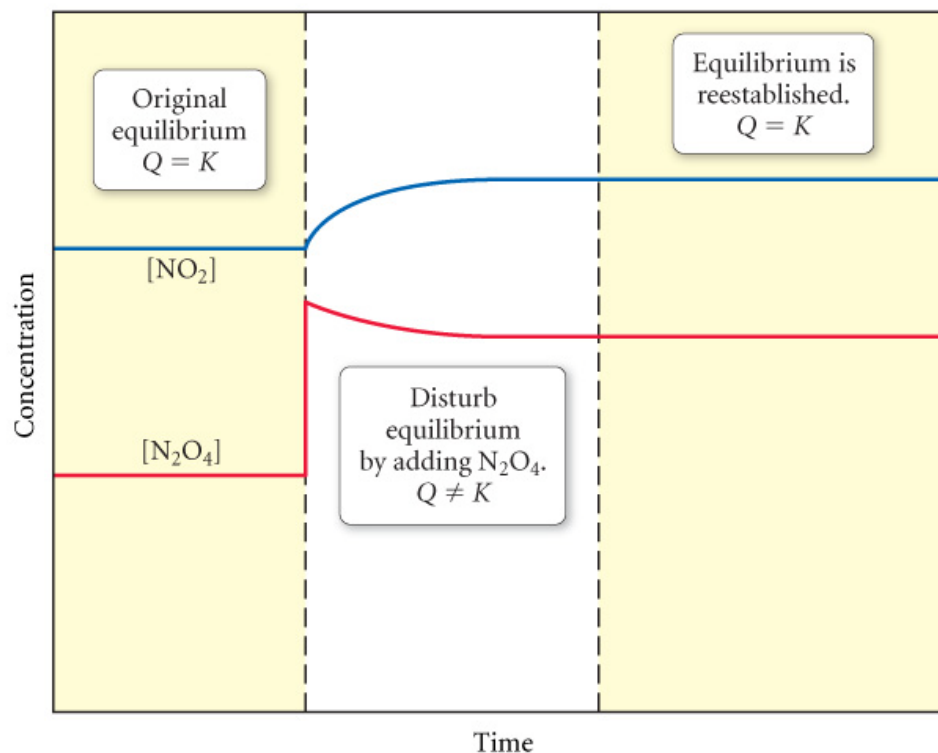


Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



Ao se adicionar NO_2 , parte dele reage para formar mais N_2O_4

O Efeito das Variações de Concentração no Equilíbrio



Quando se adiciona N_2O_4 , parte dele se decompõe, formando NO_2

Efeito da Variação de Volume no Equilíbrio

- a diminuição do tamanho do recipiente aumenta a concentração de todos os gases nele contidos
 - ✓ aumenta suas pressões parciais
 - ✓ se suas pressões parciais aumentam, então a pressão total no recipiente irá aumentar
- pelo princípio de Le Châtelier, o equilíbrio irá se deslocar no sentido de diminuir esta pressão
 - ✓ para isso, o sistema deve reduzir o número de moléculas de gás no recipiente
- **quando o volume diminui, o equilíbrio se desloca para o lado com menor número de moléculas de gás**

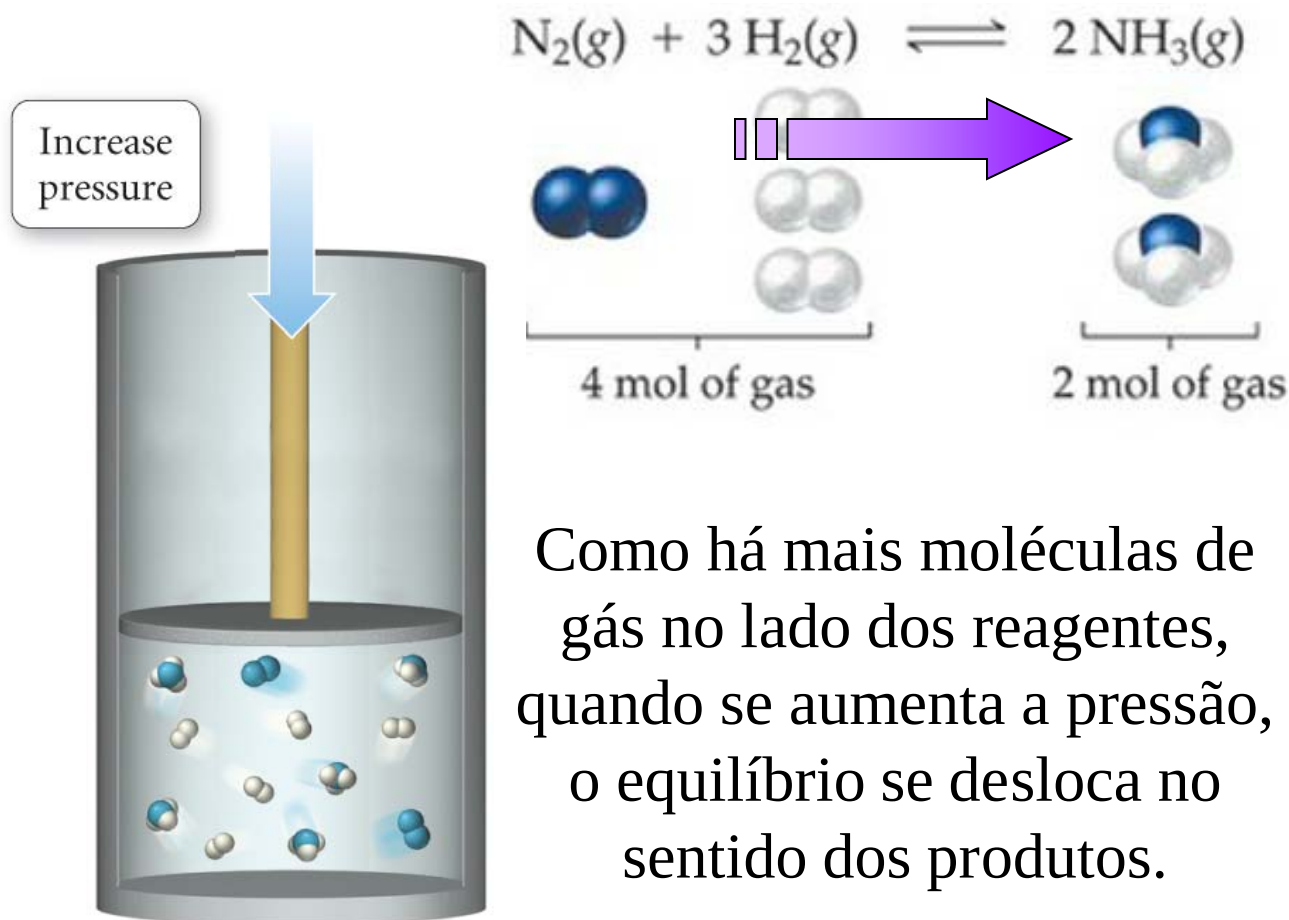
Perturbando o Equilíbrio: Variação de Volume

- Estabelecido o equilíbrio, como a diminuição do volume do recipiente irá afetar a pressão total de sólidos, líquidos e gases? Como isso irá afetar a concentração de sólidos, líquidos, soluções e gases? Qual será a resposta? Como isso irá afetar o valor de K ? O Luís Fabiano será o maior artilheiro da história do SPFC?

Perturbando o Equilíbrio: Redução de Volume

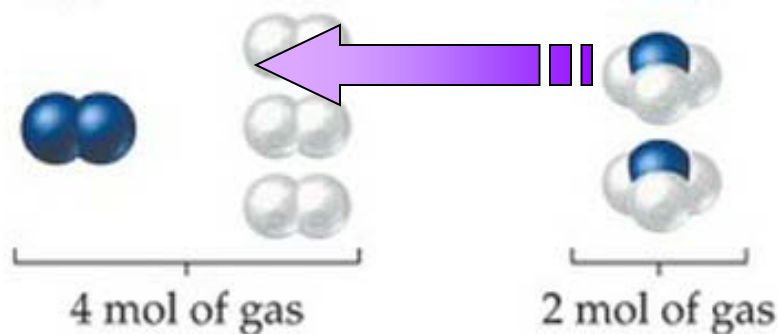
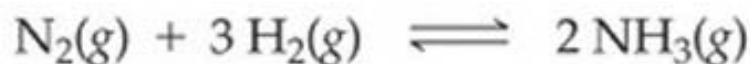
- para sólidos, líquidos e soluções, a variação do tamanho do recipiente não afeta a concentração e, portanto, não afeta a posição de equilíbrio
- reduzir o volume do recipiente aumenta a pressão total
 - ✓ Lei de Boyle $\rightarrow P_1V_1 = P_2V_2$
 - ✓ se a pressão total aumenta, as pressões parciais dos gases aumentam
 - Lei das pressões parciais de Dalton
- diminuir o volume do recipiente aumenta a concentração de todos os gases
 - ✓ mesmo número de mols, mas o número de litros é diferente, resultando em molaridade diferente
- como a pressão total aumenta, a posição de equilíbrio será deslocada para remover a pressão, removendo moléculas de gás.
 - ✓ deslocamento para o lado com menos moléculas gasosas
- na nova posição de equilíbrio, os valores das pressões parciais dos reagentes e produtos gasoso será tal que a constante de equilíbrio permanecerá a mesma.

O Efeito de Variações de Volume no Equilíbrio

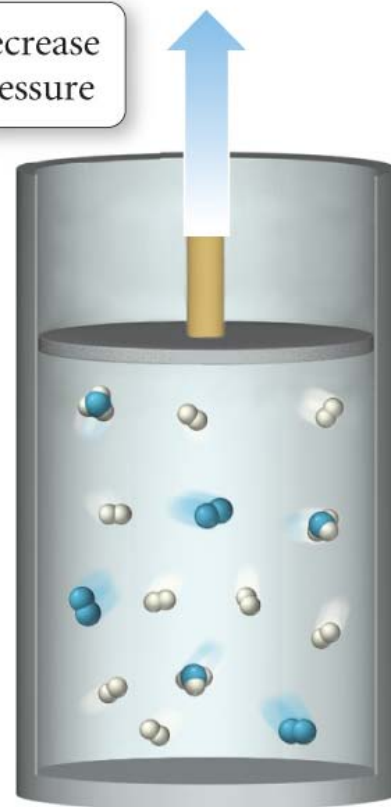


Como há mais moléculas de gás no lado dos reagentes, quando se aumenta a pressão, o equilíbrio se desloca no sentido dos produtos.

O Efeito de Variações de Volume no Equilíbrio



Decrease
pressure



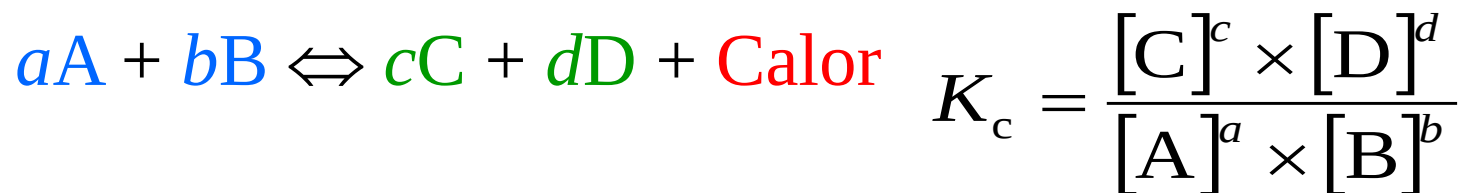
Quando se diminui a pressão através do aumento de volume, a posição do equilíbrio se desloca para o lado com maior número de moléculas de gás – o lado dos reagentes

O Efeito das Variações de Temperatura Sobre o Equilíbrio

- reações exotérmicas liberam energia e reações endotérmicas absorvem energia
- se representarmos o calor como um produto numa reação exotérmica ou como reagente em uma reação endotérmica, o princípio de Le Châtelier nos ajudará a prever o efeito de variações de temperatura
 - ✓ ainda que o calor não seja matéria e não deva ser escrito numa equação química correta.

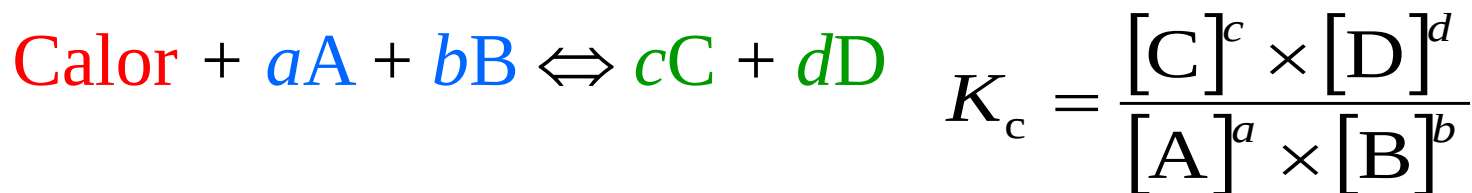
O Efeito das Variações de Temperatura Sobre o Equilíbrio em Reações Exotérmicas

- numa reação exotérmica, o calor é um produto
- aumentar a temperatura equivale a adicionar calor
- pelo princípio de Le Châtelier, o equilíbrio se desloca no sentido oposto ao da adição de calor
- **a adição de calor a uma reação exotérmica irá diminuir as concentrações de produtos e aumentar as concentrações de reagentes**
- **a adição de calor a uma reação exotérmica irá causar uma diminuição do valor de K**
- como uma redução de temperatura afetará o sistema?



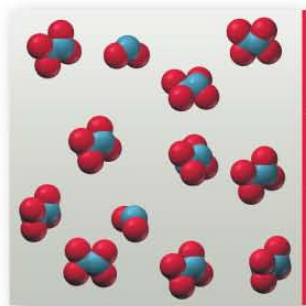
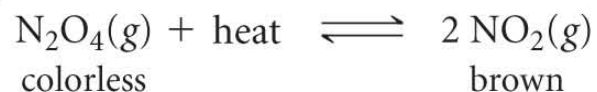
O Efeito das Variações de Temperatura Sobre o Equilíbrio em Reações Endotérmicas

- numa reação endotérmica, o calor é um reagente
- aumentar a temperatura equivale a adicionar calor
- pelo princípio de Le Châtelier, o equilíbrio se desloca no sentido oposto ao da adição de calor
- **a adição de calor a uma reação endotérmica irá diminuir as concentrações de reagentes e aumentar as concentrações de produtos**
- **a adição de calor a uma reação endotérmica irá causar um aumento do valor de K**
- como uma redução de temperatura afetará o sistema?

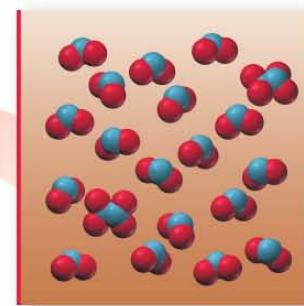


O Efeito das Variações de Temperatura Sobre o Equilíbrio

Le Châtelier's Principle: Changing Temperature



Lower temperature:
N₂O₄ favored



Higher temperature:
NO₂ favored

Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Catálise – Não Muda a Posição do Equilíbrio

- os catalisadores fornecem um caminho alternativo, mais eficiente
- funcionam tanto para a reação direta quanto para a inversa
- afetam a velocidade das reações direta e inversa da mesma forma – pelo mesmo fator
- portanto, **catalisadores não afetam a posição de equilíbrio**

Exemplos – Princípio de Le Châtelier

- A reação $2 \text{SO}_2(g) + \text{O}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{SO}_3(g)$ com $\Delta H^\circ = -198 \text{ kJ}$ está em equilíbrio. Como cada variação a seguir irá afetar as novas concentrações, após o restabelecimento do equilíbrio?
 - ✓ adição de mais O_2 ao recipiente
 - ✓ condensação e remoção de SO_3
 - ✓ compressão dos gases
 - ✓ resfriar do recipiente
 - ✓ dobrar o volume do recipiente
 - ✓ aquecer a mistura
 - ✓ adição de He ao recipiente
 - ✓ adição de um catalisador

Exemplos – Princípio de Le Châtelier

- A reação $2 \text{SO}_2(g) + \text{O}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{SO}_3(g)$ com $\Delta H^\circ = -198 \text{ kJ}$ está em equilíbrio. Como cada variação a seguir irá afetar as novas concentrações, após o restabelecimento do equilíbrio?

✓ adição de O_2 ao recipiente	Mais SO_3
✓ condensação e remoção de SO_3	Mais SO_3
✓ compressão dos gases	Mais SO_3
✓ resfriar do recipiente	Mais SO_3
✓ dobrar o volume do recipiente	Mais SO_2
✓ aquecer a mistura	Mais SO_2
✓ adição de He ao recipiente	sem efeito
✓ adição de um catalisador	sem efeito