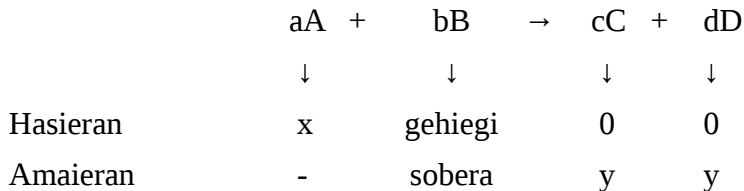


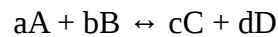
5. OREKA KIMIKOAK

1. Oreka motak

Erreakzio itzulezina:



Erreakzio itzulgarria:



Erreakzio itzulgarrietan erreaktiboak erreakzionatzean produktuak eraten dira eta produktuek berriro erreakzionatu eta erreaktibo bilakatzen dira, etengabe. Beraz, transformazio kimikoa noranzko batean zein alderantzizkoan gertatzen da. Hori dela eta, egoera dinamikoa da.

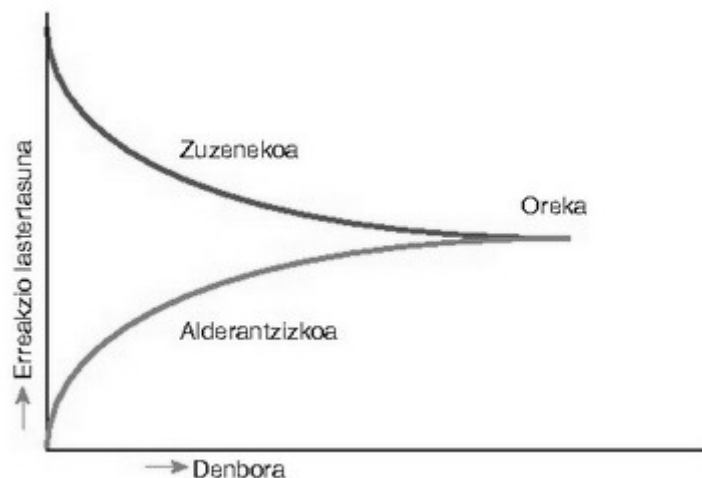
Erreakzio itzulgarrietan oreka kimikoko egoera ematen da, hots, erreakzio zuzenaren abiadura eta alderantzizko erreakzioaren abiadura elkarren berdinak diren egoera.

Izan ere, sistema orekan ez dagoenean, erreakzio zuzenak eta alderantzizko erreakzioak abiadura bat dute, desberdina.

$$V_1 = k_1 [A]^x [B]^y$$
$$V_2 = k_2 [C]^n [D]^m$$

Bi abiadura hauek bat datozenean, sistema oreka kimikoan dago.

$$V_1 = V_2$$

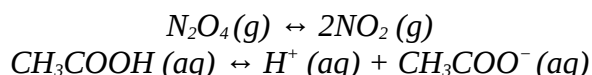


Sistema oreka kimikoan dagoenean, $\Delta G = 0$.

Oreka homogenea

Erreaktibo eta produktu guztiak egoera fisiko berean daude (gasak eta disoluzio akuosoak).

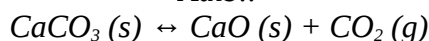
Adib.:



Oreka heterogenea

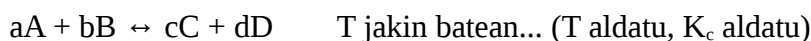
Erreaktiboak eta produktuak egoera fisiko desberdinean daude.

Adib.:



2. Oreka konstantea (K_c)

Oreka egoeran erreaktiboan eta produktuen arteko erlazioa da.



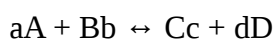
Oreka konstantea edo K_c orekako produktuen kontzentrazioen eta erreaktiboan kontzentrazioen zatidura da, temperatura zehatz batean, konstantea, hasierako kontzentrazioen balioen independentea.

$$K_c = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} \rightarrow \text{Adierazpen hau } \mathbf{masa-ekintzaren legea} \text{ izenez ezagutzen da.}$$

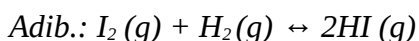
[] : kontzentrazioak oreka egoeran

K_c : unitaterik ez!

K_c -ren adierazpena horrela lortzen da:



$$\left. \begin{aligned} V_1 &= k_1 [A]^x [B]^y \\ V_2 &= k_2 [C]^m [D]^n \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\mathbf{OREKAN!} \\ &V_1 = V_2 \end{aligned} \rightarrow k_1 [A]^x [B]^y = k_2 [C]^m [D]^n \rightarrow \frac{k_1}{k_2} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = K_c$$



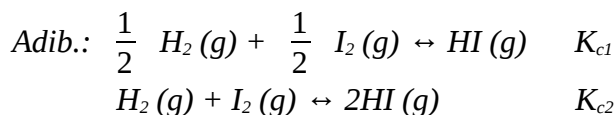
$$K_c = \frac{[HI]^2}{[I_2][H_2]}$$

K_c -ren balioak erreakzioaren desplazamendua adierazten du:

- $K_c > 1 \rightarrow [P] > [E] \rightarrow$ eskuinerantz
- $K_c < 1 \rightarrow [P] < [E] \rightarrow$ ezkerrerantz
- $K_c = \infty \rightarrow$ produktuak baino ez daude \rightarrow ITZULEZINA!

K_c -ren ezaugarriak

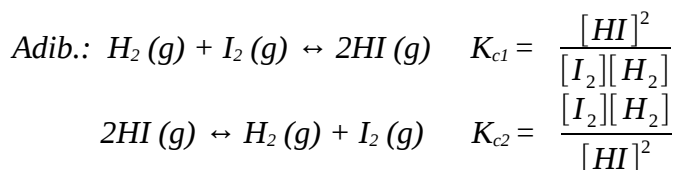
1. Estekiometriaren menpe dago.



$$\text{Erreakzio}_2 = 2 \cdot \text{erreakzio}_1 \rightarrow K_{c2} = K_{c1}^2$$

$$\text{Erreakzio}_2 = n \cdot \text{erreakzio}_1 \rightarrow K_{c2} = K_{c1}^n$$

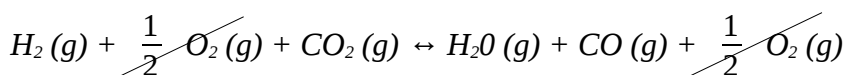
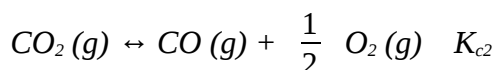
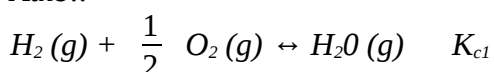
2. Noranzkoaren menpe dago.



$$K_{c1} = \frac{1}{K_{c2}}$$

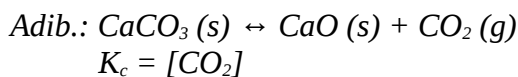
3. Erreakzioa etapaka agertzen bada:

Adib.:



$$K_c = K_{c1} \cdot K_{c2}$$

4. Oreka heterogeneotan solidoak eta likido puruak ez dira agertzen K_c -n, K_c -n gasak edo disoluzio akuosoak baino ez dira agertzen.



5. Erreakzio-zatidura.

Masa-ekintzaren legea oreka lortu ez duen erreakzio batean aplikatuz gero, ez dugu K_c -ri buruz hitz egiten, Q_c -ri buruz baizik.

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

[]_o : kontzentrazioa ez da orekako kontzentrazioa, beste kontzentrazio batzuk dira (adibidez, hasierakoa).

Q_c -k erreakzioaren eboluzioak jakiteko balio du.

- $Q_c = K_c \rightarrow$ sistema OREKAN dago.
- $Q_c > K_c \rightarrow$ sistema eskuinera desplazatuta dago, produktu asko daude.
Oreka lortzeko sistema ezkererantz desplazatu behar da.
- $Q_c < K_c \rightarrow$ sistema ezkerretara desplazatuta dago, erreaktibo asko daude.
Oreka lortzeko sistema eskuinerantz desplazatu behar da.

6. K_c eta disoziazio-gradua (α)

Erreaktibo batean disoziatzen ari den mol kopurua.

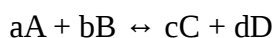
$$\left. \alpha = \frac{\Delta n}{n_o} \right\} \begin{array}{l} \bullet \Delta n : \text{disoziatutako mol kopurua (erreakzionatzen duena. ESTEKIOMETRIA.)} \\ \bullet n_o : \text{hasierako mol kopurua} \end{array}$$

$$\text{Edo, } \alpha = \frac{\Delta C}{C_o}$$

- $\alpha \uparrow K_c \uparrow$

3. Oreka-konstantea (K_p)

Erreaktiboak eta produktuak gasak direnean oreka konstantea gasen orekako presio partzialaren arabera adieraz daiteke.



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

$$\rightarrow K_c \text{ eta } K_p : K_p = K_c (RT^{\Delta n})$$

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

$$\rightarrow \Delta G^\circ \text{ eta } K_p : K_p = e^{\frac{-\Delta n^\circ}{RT}} \rightarrow \Delta G^\circ = -RT \cdot \ln K_p$$

4. Le Chatelier printzipioa

Oreka bat eragiten duten faktoreen (P, V, T eta []) kanpo-aldaketak sistemaren birdoiketa dakar, oreka-egoera berria lortu ahal izateko. Hau da, oreka lortzeko erreaktiboak eta produktuak berri ajustatu behar dira.

P, V, T eta [] \rightarrow hauen aldakuntzek eragina dute orekan.

Printzipioak, beraz, dio: oreka dagoen sistema batean eragina duten faktoreen baten aldakuntza egonez gero, sistema aldaketaren kontra joango da orekara bueltatzeko.

a) Kontzentrazio-aldakuntzak (K_c mantendu)

- Kontzentrazio-handitzea
 - erreaktibo \uparrow izendatzailea $\uparrow \rightarrow$ zatidura \downarrow
 $Q_c < K_c \rightarrow$ sistema eskuinerantz desplazatu behar da, erreaktibo gehiegi daude beraz produktuak sortzeko joera handitzen da.
 - Produktu \uparrow zenbakitzailea $\uparrow \rightarrow$ zatidura \uparrow
 $Q_c > K_c \rightarrow$ sistema ezkererantz desplazatu behar da, sistemak produktuen kopurua gutxitu nahi du, beraz erreaktiboak sortuko ditu.

- Kontzentrazio-gutxitzea
 - erreaktibo ↓ izendatzaile ↓ → zatidura ↑
 $Q_c > K_c$ → sistema ezkerrerantz desplazatu behar da.
 - Produktu ↓ zenbakitzaile ↓ → zatidura ↓
 $Q_c < K_c$ → sistema eskuinerantz desplazatu behar da.

b) Presio- eta bolumen-aldakuntzak (K_c mantendu)

$PV = nRT$ → P eta V alderantziz proportzionalak dira.

- $V \uparrow P \downarrow$ → sistema gasen mol kopuru handienerantz desplazatuko da.
- $V \downarrow P \uparrow$ → sistema gasen mol kopuru txikienerantz desplazatuko da.

Erreaktiboek mol kopurua = produktuen mol kopurua → P eta V-k ez dute eraginik.

ADI!

- Bolumena bikoiztu:

$$[\]' = \frac{mol}{2V}$$

$$[\]' = \frac{[\]}{2}$$

- Bolumena erdira:

$$[\]' = \frac{mol}{\frac{V}{2}}$$

$$[\]' = 2 [\]$$

c) Temperatura-aldakuntzak

Temperatura aldatuz gero, K_c eta K_p aldatzen dira.

$$T_1 \rightarrow K_1$$

$$T_2 \rightarrow K_2$$

$$\ln \frac{K_1}{K_2} = \frac{-\Delta H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \rightarrow \text{Van't Hoff ekuazioa}$$

Erreakzioa endotermikoa ($\Delta H > 0$, energia xurgatu) edo exotermikoa ($\Delta H < 0$, energia askatu) bada, aldatu egingo da temperaturarekin oreka-konstanteak duen erlazioa:

- Endotermikoa: $T \uparrow K \uparrow$ → sistema eskuinera desplazatuko da, produktuak sortzeko joera.
 $(Q_c < K_c)$
 $T \downarrow K \downarrow$ → sistema ezkerrera desplazatuko da, erreaktiboak sortzeko joera.
 $(Q_c > K_c)$
- Exotermikoa: $T \uparrow K \downarrow$ → sistema ezkerrera desplazatuko da, erreaktiboak sortzeko joera.
 $(Q_c > K_c)$
 $T \downarrow K \uparrow$ → sistema eskuinera desplazatuko da, produktuak sortzeko joera.
 $(Q_c < K_c)$

Beste era batean esanda,

- $T \uparrow$ → sistema erreakzio endotermikoaren noranzkoan desplazatuko da.
- $T \downarrow$ → sistema erreakzio exotermikoaren noranzkoan desplazatuko da.

ARIKETAK EGITEKO!!!

- K_c -k parte hartzen duen kasuetan kalkuluak egiteko:

	A	B	C	D
Hasierako molak, n_o				
Orekara heltzeko aldakuntzak, Δn				
Orekako molak, n_{or}				
Orekako kontzentrazioak, [] _{or}				

- K_p -k parte hartzen duen kasuetan kalkuluak egiteko:

	A	B	C	D
Hasierako molak, n_o				
Orekara heltzeko aldakuntzak, Δn				
Orekako molak, n_{or}				
Frakzio molarak, χ				
Orekako presio partzialak, P_x				