

Algunes reflexions al voltant del tractament de l'equilibri químic en el batxillerat

Some reflexions about the treatment of chemical equilibrium in the baccalaureate

Francesc A. Centellas i Masuet / Departament de Química Física. Facultat de Química. Universitat de Barcelona



resum

En aquest escrit, s'hi recorda el tractament que rebia l'equilibri químic en el batxillerat que va estudiar l'autor de l'article i es compara amb el que s'imparteix en el batxillerat actual. S'hi palesa que, en el batxillerat d'avui dia, l'equilibri químic rep un tractament força més extens i amb una càrrega conceptual més elevada que la d'aquells anys. Aquest fet pot comportar, si la matèria no es tracta amb el temps requerit, que els estudiants d'avui dia no acabin d'entendre gaire bé el significat ni la utilitat de les magnituds i les constants fisicoquímiques introduïdes i, a la vegada, es dificulti que puguin assolir completament uns altres objectius més elementals.

D'altra banda, a partir de la revisió d'alguns dels textos de química més usats en els centres de batxillerat, en el present article es proposa tornar a considerar el tractament que reben certs aspectes concrets de l'equilibri químic i, en aquest sentit, s'hi discuteixen algunes de les inconveniències observades i s'hi plantegen alternatives per tractar els diferents aspectes d'una manera més adient

paraules clau

Equilibri químic, batxillerat, constants d'equilibri, estats estàndard.

abstract

This paper compares the explanation of chemical equilibrium when the author was a student, to the current one in Catalanian high schools today. It can be seen that the current chemical equilibrium explanation is more extensive and it has a greater conceptual importance than in the past. This can cause a problem if not enough time is given to teaching the subject, leading to a poor understanding of the meaning and use of the physicochemical magnitudes and constants. At the same time, this problem can hinder the reaching of other basic goals.

On the other hand, after the revision of the most used chemistry textbooks at high school level, a reconsideration of some aspects of the chemical equilibrium explanation is proposed. And so, some of the observed problems with the textbooks are discussed and alternative proposals for a clearer treatment of the subject are suggested.

key words

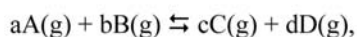
Chemical equilibrium, high school, equilibrium constant, standard condition

El tractament de l'equilibri químic en els batxillerats de fa uns quants anys

Un cop decidit que aquest article versaria sobre el tractament que es dona a l'equilibri químic en el batxillerat actual, vaig procurar fer memòria dels continguts de termodinàmica que estudiàvem al llarg del batxillerat i del curs pre-universitari de la meua joventut.

Recordo vagament haver-hi entrat en contacte amb el primer principi de la termodinàmica. No recordo, en canvi, haver-hi treballat el segon principi, però sí haver-hi fet exercicis i problemes de termoquímica aplicant la llei de Hess i fent servir una magnitud estranya que el professor anomenava *entalpia*, per calcular la calor a pressió constant bes-canviada al llarg d'un procés químic determinat. Fins que no vaig ingressar a la Facultat, no recordo haver sentit parlar mai de l'energia de Gibbs; i pel que fa al tractament de l'equilibri químic, una part de l'assignatura que també es treballava en el batxillerat d'aquells anys, aquest s'hi introduïa definint de manera empírica l'expressió de la constant K_c , la qual s'expressava amb unitats (1).

Fa molts menys anys, el tractament de l'equilibri químic s'estudiava, essencialment, al COU i, gràcies a haver guardat els textos que van utilitzar els meus fills, he pogut fer una revisió més acurada del tema que estem tractant. L'equilibri químic s'introduïa a partir de l'evidència experimental i per a una reacció homogènia en fase gasosa del tipus:



les expressions de K_c i K_p tenien la forma:

$$K_c = \frac{[C]_{eq}^c \cdot [D]_{eq}^d}{[A]_{eq}^a \cdot [B]_{eq}^b} \quad K_p = \frac{(p_C)_{eq}^c (p_D)_{eq}^d}{(p_A)_{eq}^a (p_B)_{eq}^b}$$

(equacions 1 i 2)

on $[A]_{eq}$, $[B]_{eq}$, $[C]_{eq}$ i $[D]_{eq}$ i $p_{A eq}$, $p_{B eq}$, $p_{C eq}$ i $p_{D eq}$, com sabem, representen les molaritats i les pressions parcials de les substàncies A, B, C i D en l'equilibri, i a, b, c i d, els coeficients estequiomètrics de cadascuna en la reacció. Emprant un argument incorrecte, en el text dels meus fills es deia que, atès que, a l'hora de calcular K_c , les concentracions de les espècies reaccionants sempre s'expressaven en molaritats, es podien ometre les dimensions de la constant.

El tractament de l'equilibri en el batxillerat d'avui dia

Un cop acceptada la responsabilitat de la matèria de química de les PAU, vaig repassar el programa de l'assignatura que el Departament d'Ensenyament (ara d'Educació) havia establert per al

batxillerat. Simultàniament, vaig demanar a diversos companys que feien la docència de la matèria en centres de secundària que m'indiquessin quins eren els tres textos de química que més s'utilitzaven a casa nostra al llarg del batxillerat. En els textos recomanats, vaig poder comprovar que el tractament d'un equilibri homogèni en fase gasosa es feia d'una manera semblant al COU d'uns quants anys abans. Hi apareixien les constants K_p i K_c i, en tots, es relacionava el valor de la constant d'equilibri (en dos dels textos, no es mencionava explícitament si es tractava de K_p o de K_c) amb la variació de l'energia de Gibbs estàndard segons l'equació 3.

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_p \quad (\text{equació 3})$$

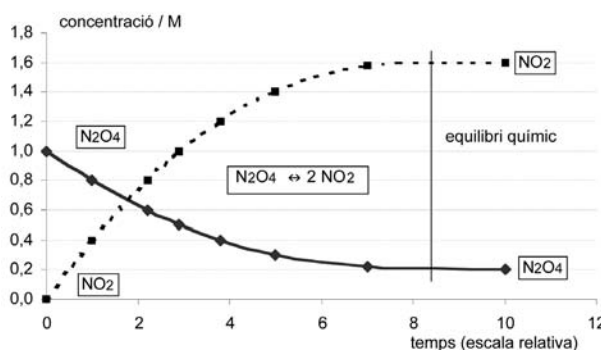


FIGURA 1.

Representació de l'evolució de les concentracions de N_2O_4 i NO_2 al llarg del temps de reacció.

Aquesta mena de representacions, on passat un temps els reactius i els productes acaben assolint unes concentracions estacionàries, són utilitzades en molts llibres de química elemental per introduir i tractar l'equilibri químic.



En dos dels textos, davant la lògica impossibilitat de seguir un tractament termodinàmic rigorós, l'equilibri s'hi introduïa d'una manera inductiva a partir de l'evidència experimental (figura 1), indicant que, en els sistemes químics, un cop arribats a l'equilibri, es compleix l'equació 1, en què K_c és una constant que tan sols es veu influïda per la temperatura. En el tercer text, però, l'expressió de K_c s'hi introduïa fent servir una metodologia deductiva de naturalesa cinètica. Així, un cop assenyalada la naturalesa dinàmica de l'equilibri químic, s'hi indicava que, en aquesta situació, s'havia de complir que la velocitat de la reacció directa, v_d , havia de ser igual a la velocitat de la reacció inversa, v_i .

El problema sorgia, però, a l'hora d'establir les expressions d'aquestes dues velocitats. En un capítol anterior, on es feia el tractament de la cinètica de les reaccions, en aquest mateix llibre, s'hi indicava que l'expressió general de la velocitat d'una reacció $aA + bB \rightarrow cC + dD$ era:

$$v = k [A]^a [B]^b$$

(equació 4)

i s'hi remarcava que a i b eren dos coeficients experimentals que rebien el nom d'*ordres parcials de reacció* i que no tenien res a veure amb els coeficients estequiomètrics a i b . Malgrat això, en el capítol dedicat a l'estudi de l'equilibri químic, per tal de «deduir» l'expressió de la constant d'equilibri, ordres i coeficients estequiomètrics s'hi consideraven una mateixa cosa i s'hi escrivien incorrectament les equacions de la velocitat següents:

$$v_d = k_d [A]^a [B]^b \text{ i } v_i = k_i [C]^c [D]^d$$

(equacions 5 i 6),

de manera que, per a la situació d'equilibri químic on es complia que $v_d = v_i$, se'n deduïa l'expressió:

$$K_c = \frac{k_d}{k_i} = \frac{[C]_{eq}^c \cdot [D]_{eq}^d}{[A]_{eq}^a \cdot [B]_{eq}^b}$$

(equació 7)

Un tractament d'aquesta mena, pel fet de ser fals (sovint els ordres parcials no coincideixen amb els coeficients estequiomètrics), s'hauria d'evitar. Encara que els estudiants de batxillerat no s'adonin d'aquesta falsedat, el problema podrà sorgir si, més endavant, decideixen estudiar alguna llicenciatura amb uns continguts de caràcter químic d'un cert nivell, atès que, en aquests casos, trobaran que hauran de replantejar un criteri que donaven per correcte.

No hi ha res de dolent a introduir l'equació de K_c tal com fan els altres textos consultats, és a dir, considerant que és una expressió a la qual s'ajusten les concentracions experimentals (o, en el seu cas, les pressions parcials) de productes i reactius en les reaccions homogènies reversibles, un cop s'assoleix la situació d'equilibri químic (figures 1 i 2).

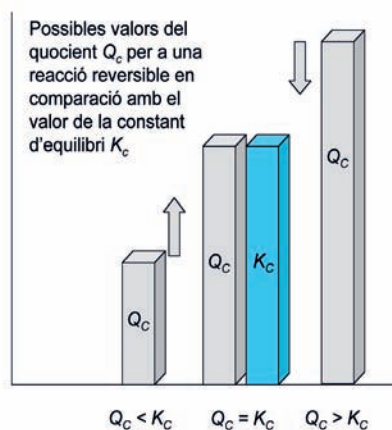


FIGURA 2.

Les unitats de les constants d'equilibri

En dos dels textos, les constants d'equilibri K_c i K_p s'hi expressaven amb unitats $(\text{mol}/\text{dm}^3)^{\Delta n}$ i $\text{atm}^{\Delta n}$, mentre que, en l'altre text, K_c s'hi expressava de manera adimensional, argumentant sense cap raó lògica que això podia fer-se, perquè les concentracions sempre s'expressaven en molaritats. Per contra, en aquest mateix text, s'hi recomanava assignar unitats a K_p , a fi d'evitar confusions, ja que les pressions parcials dels gasos podien expressar-se en les unitats clàssiques (atm) o bé en les del sistema internacional (Pa).

D'altra banda, en tots tres textos consultats, hi apareixia plantejada (en dos casos sense indicar de quina constant es tractava) la relació entre K_p i la variació de l'energia de Gibbs estàndard (equació 2), així com la que relaciona les constants K_p i K_c .

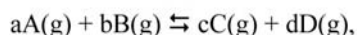
$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$

(equació 8)

Els químics sabem que les constants d'equilibri són adimensionals (2, 3). El caràcter adimen-

En alguns textos de química general (7, 8), s'hi utilitzen representacions com la indicada a l'hora d'introduir i tractar els sistemes en equilibri químic. Fent servir el quocient de reacció, Q_c , s'indica que, si aquest és més petit que la constant d'equilibri K_c , el sistema evoluciona cap a la formació de productes fins que s'arriba a complir $Q_c = K_c$. Ben al contrari, si el quocient de reacció és més gran que la constant d'equilibri K_c , el sistema evoluciona cap a la formació de reactius. Un cop assolit l'equilibri químic, de naturalesa dinàmica, mentre la temperatura sigui constant, les concentracions de reactius i de productes es mantindran invariables en el temps

sional de K_p i K_c és conseqüència del fet que, en l'expressió d'aquestes constants, la pressió parcial d'un gas o la concentració en l'equilibri ($p_{i\text{ eq}}$ o $c_{i\text{ eq}}$) es refereix a la pressió o a la concentració de la substància en l'estat estàndard (p^θ o c^θ). D'aquesta manera, per a una reacció genèrica en fase gasosa com ara:



les expressions correctes de K_c i K_p prenen la forma:

$$K_c = \frac{(c_C/c^\theta)^c \text{ eq } (c_D/c^\theta)^d \text{ eq}}{(c_A/c^\theta)^a \text{ eq } (c_B/c^\theta)^b \text{ eq}} \quad K_p = \frac{(p_C/p^\theta)^c \text{ eq } (p_D/p^\theta)^d \text{ eq}}{(p_A/p^\theta)^a \text{ eq } (p_B/p^\theta)^b \text{ eq}}$$

(equacions 9 i 10)

on:

- $c_{i\text{ eq}}$ = concentració molar de cada gas i en l'equilibri;
- c^θ = concentració molar del gas en l'estat normal o estàndard (1 M);
- $p_{i\text{ eq}}$ = pressió parcial de cada gas i en l'equilibri;
- p^θ = pressió del gas en l'estat normal o estàndard (1 bar).

Abans de 1982, es considerava que la pressió d'un gas en el seu estat estàndard era 1 atm, per bé que, posteriorment a aquesta data, la IUPAC (4, 5), amb la voluntat de no variar pràcticament el valor de la pressió de l'estat estàndard considerat abans i, alhora, fer servir un múltiple sencer de la unitat de pressió en el sistema internacional, el pascal, va recomanar que la pressió d'un gas en l'estat estàndard (p^θ) passés a ser 1 bar (10^5 Pa).

Tant si la pressió d'un gas en l'estat estàndard es considera, com abans es feia, 1 atm, com si es considera, seguint la recomanació actual de la IUPAC, 1 bar, el valor numèric de K_p es pot obtenir a partir de l'equació 2, que prové de l'equació 10, on s'ha substituït, segons criteri antic o actual, p^θ per 1 atm o 1 bar i és,

El caràcter adimensional de K_p i K_c és conseqüència del fet que, en l'expressió d'aquestes constants, la pressió parcial d'un gas o la concentració en l'equilibri ($p_{i\text{ eq}}$ o $c_{i\text{ eq}}$) es refereix a la pressió o a la concentració de la substància en l'estat estàndard (p^θ o c^θ)

Atès que la relació entre bars, atmosferes i pascals és:
1 bar = 10^5 Pa = 0,98692 atm,

la proposta de la IUPAC (1982), consistent a considerar la pressió de l'estat estàndard d'un gas com 1 bar, no suposava cap modificació important respecte a la pressió considerada amb anterioritat (1 bar = 0,98692 atm), per bé que passava a ser un múltiple exacte de la unitat de pressió en el SI (1 bar = 10^5 Pa).

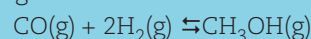
de fet, l'expressió que es fa servir actualment per expressar K_p en tots els llibres de química de batxillerat i també en diversos textos actuals de química general (7).

Com resulta evident, amb dependència que les pressions

parcials dels gasos en l'equilibri s'expressin en atm o en bar, els resultats obtinguts per a K_p i ΔG^θ no coincidiran (6). Ho podem veure, per exemple, en el cas d'un dels exercicis proposats en la prova de química de les PAU de juny de 2006.

Enunciat exercici prova PAU juny 2006

La síntesi del metanol (alcohol metílic) es basa en l'equilibri següent:



En un reactor cilíndric d'1 L de capacitat, s'hi disposen 2,0 mol de CO i 2,0 mol d'hidrogen i s'escalfa el conjunt fins a 600 K. Considerant que, un cop assolit l'equilibri, s'han format 0,80 mol de metanol, calculeu el valor de K_p a 600 K.

Solució:

	CO	H ₂	CH ₃ OH
Mols inicials	2,0	2,0	0
Mols en l'equilibri	2,0-0,8	2,0-1,6	0,8
Concentració en l'equilibri / mol dm ⁻³	1,2	0,4	0,8
Pressions parcials en l'equilibri / atm	59,0	19,7	39,4
Pressions parcials en l'equilibri / bar	59,8	20,0	39,9

Quan el càlcul de K_p es fa a partir de les pressions parcials expressades en atm o en bar, els resultats obtinguts són:

K_p (constant adimensional)	K_p (constant adimensional)
càlcul fet a partir de pressions en atm: $1,72 \cdot 10^{-3}$	càlcul fet a partir de pressions en bar: $1,67 \cdot 10^{-3}$

amb la qual cosa, el valor de ΔG^0 calculat a partir de l'expressió $\Delta G^0 = -RT \ln K_p$, on K_p és una magnitud adimensional i R val $8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$, serà:

ΔG^0 (pressió de l'estat estàndard = 1 atm)	ΔG^0 (pressió de l'estat estàndard = 1 bar)
$31,8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$31,9 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

Com es pot veure, atès que les pressions de l'estat estàndard anterior a 1982 (1 atm) i actual (1 bar) són molt properes, els valors que s'obtenen per a K_p i ΔG^0 també són molt semblants. Aquest fet, que pràcticament es compleix en el cas de totes les magnituds i constants termodinàmiques (6), ha donat peu al fet que, quan es tracta l'equilibri químic en textos de química general publicats recentment (7, 8), encara trobem que en alguns (7) se segueixen utilitzant les atmosferes per expressar les pressions parcials.

El fet de prendre com a expressió correcta de K_p l'equació 2 en lloc de l'equació 10, sumat a pensar que la pressió parcial d'un gas avui dia s'hagi d'expressar obligatòriament en unitats del

sistema internacional, pot portar a l'error de calcular K_p expressant les pressions parcials dels gasos en l'equilibri en pascals. Si es fes així en el cas de l'exemple considerat anteriorment, atès que les pressions parcials dels reactius i dels productes en equilibri expressades en Pa són:

Cal observar que, atès que K_p és una magnitud adimensional, les unitats de ΔG^0 tan sols són condicionades per les unitats de la constant R, que, d'altra banda, seran les pròpies del sistema internacional ($R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$).

D'altra banda, el fet de considerar K_p amb unitats, a part de ser incorrecte, complicaria enormement la identitat de dimensions en l'equació $\Delta G^0 = -RT \ln K_p$.

	CO	H ₂	CH ₃ OH
Pressió parcial en l'equilibri / atm	59,0	19,7	39,4
Pressió parcial en l'equilibri / Pa	$6,0 \times 10^6$	$2,0 \times 10^6$	$4,0 \times 10^6$

el valor numèric obtingut per a la constant K_p seria $1,7 \times 10^{-13}$:

$$K_p = \frac{6,0 \times 10^6}{(2,0 \times 10^6)^2 \times 4,0 \times 10^6} = 1,7 \times 10^{-13}$$

notòriament més petit que els valors de $1,72 \times 10^{-3}$ o $1,67 \times 10^{-3}$ calculats amb anterioritat.

Aquesta gran diferència és deguda a la circumstància que, si les pressions parcials dels gasos s'expressen en pascals, de fet s'estaria considerant de manera implícita que la pressió d'un gas en el seu estat estàndard seria 1 Pa. Si bé això és possible (les condicions dels estats estàndard es defineixen a voluntat), atès que la majoria de les reaccions tenen lloc a pressions properes a 1 atm, un estat estàndard amb una pressió tan petita no tindria cap mena d'interès ni d'utilitat.

La relació entre les constants d'equilibri

En els tres textos consultats, les constants d'equilibri K_c i K_p d'una reacció homogènia en fase gasosa es relacionen entre si mitjançant l'equació 8, on $\Delta \nu = c + d - a - b$.

En la termodinàmica de l'equilibri químic, l'escriptura correcta de l'equació 8 és:

$$K_p = K_c \left(RT \frac{c^\theta}{p^\theta} \right)^{\Delta n / \text{mol}}$$

(equació 11),

on c^θ i p^θ representen, respectivament, la concentració (1 mol dm^{-3}) i la pressió del gas (1 bar o, antigament, 1 atm) en l'estat estàndard.

A primera vista, l'equació 11 sembla força més complexa que la 8, si bé, en realitat, resulta molt fàcil de deduir quan es considera l'escriptura correcta de les constants d'equilibri (equacions 9 i 10). D'altra banda, aquesta darrera equació constitueix la manera més còmoda i fiable de calcular K_c a partir de K_p (o a l'inrevés), tant en el cas que es consideri que la pressió del gas en l'estat estàndard és 1 atm (criteri antic) com 1 bar (criteri vigent de la IUPAC). Vegem-ho mitjançant un exemple basat en el problema anterior.

Enunciat basat en l'exercici de les PAU 2006

A 600 K, quan la IUPAC considerava que la pressió de l'estat estàndard d'un gas era 1 atm, el valor de la constant K_p de la reacció $\text{CO}_{(g)} + 2\text{H}_{2(g)} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{OH}_{(g)}$ era $1,72 \cdot 10^{-3}$. Calculeu la K_c d'aquesta reacció, tant en el cas que la pressió de l'estat estàndard sigui 1 atm com 1 bar.

Solució:

Segui quina sigui la pressió del gas en l'estat estàndard, la concentració c^θ sempre val $1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$. Aquesta manera d'expressar la concentració (molaritats) porta, per conveniència, a expressar la constant dels gasos de la forma tradicional ($R = 0,0821 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$) i, d'aquesta manera, per calcular K_c en cas de considerar $p^\theta = 1 \text{ atm}$, fariem:

$$1,72 \cdot 10^{-3} = K_c \left(0,0821 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 600 \text{ K} \cdot \frac{1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}}{1 \text{ atm}} \right)^{-2}$$

d'on obtindríem $K_c = 4,17$.

Per calcular la K_c quan $p^\theta = 1 \text{ bar}$, calcularíem el valor de K_p per a aquest estat estàndard ($K_{p(1 \text{ bar})} = K_{p(1 \text{ atm})} \cdot 0,98692^2$) i expressaríem la pressió d'1 bar en atm (1 bar = 0,98692 atm).

$$1,67 \cdot 10^{-3} = K_c \left(0,0821 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 600 \text{ K} \cdot \frac{1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}}{0,98692 \text{ atm}} \right)^{-2}$$

d'on obtindríem $K_c = 4,16$.

En aquells textos de batxillerat i de química general (7) on les pressions parcials dels gasos en equilibri s'expressen en atm, l'aplicació de l'equació 8 no suposa cap problema i, usant $R = 0,0821 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$, K_c es pot calcular d'una manera fàcil i correcta a partir de K_p . Una situació ben diferent succeeix quan, incorrectament, es recomana expressar les pressions parcials dels gasos en equilibri en pascals.

Breu recapitulació i algunes propostes finals

1. Pel que fa a la manera d'introduir en el batxillerat les expressions de les constants d'equilibri, seria aconsellable que això sempre es fes considerant el comportament experimental dels sistemes en equilibri químic (figures 1 i 2) i no es pretengués deduir aquesta dada, de manera incorrecta, a partir de la igualació de les expressions de les velocitats.

2. Pel que fa a les unitats de les constants d'equilibri, el professorat de batxillerat hauria de valorar la conveniència d'indicar que, en realitat, són adimensionals (2, 3, 8). Això es podria fer presentant, a títol informatiu, l'expressió termodinàmica real de les constants (equacions 9 i 10). Aquest fet, sempre i quan les pressions parcials s'expressessin

seria aconsellable introduir les expressions de les constants d'equilibri considerant el comportament experimental dels sistemes en equilibri químic

en atm o bar, no suposaria cap inconvenient perquè els estudiants poguessin seguir treballant, com ara fan, amb les equacions habituals (equacions 1 i 2), en les quals no apareixen les concentracions o les pressions de l'estat estàndard, per bé que evitaria que les pressions parcials dels gasos en l'equilibri, com ara passa en alguns casos, s'expressessin en Pa i es poguessin obtenir diferents valors per a la K_p

d'una mateixa reacció a una mateixa temperatura en funció de les unitats de pressió que s'haguessin utilitzat.

3. Pel que fa a les unitats de les pressions parcials dels gasos en l'equilibri, atès que, tal com s'ha posat de manifest en l'exemple resolt, no hi ha cap gran diferència entre els resultats quan es considera que la pressió de l'estat és una atmosfera o un bar, probablement no seria necessari expressar-les en bar i es podria continuar treballant, com ara es fa en la majoria de textos de química del batxillerat, en atm, per bé que mai en Pa. D'aquesta manera, es podria seguir utilitzant l'equació 8 amb $R = 0,0821 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ per relacionar les constants K_p i K_c .

4. Finalment, pel que fa a la càrrega conceptual, és evident que el batxillerat d'avui dia considera un tractament de la termodinàmica i de l'equilibri químic força més extens i amb una càrrega conceptual més gran que el que rebia quan l'autor d'aquest article era estudiant. Això pot portar al fet que, davant la dificultat d'entendre prou bé el que veritablement representen les magnituds i les constants termodinàmiques introduïdes, els alumnes acabin adoptant una actitud memorística que els porti a fer-les servir d'una manera mecànica sense comprendre'n gaire bé la utilitat. En aquest escenari, a més, pot succeir que l'alumnat tampoc no acabi d'assolir completament alguns dels objectius docents principals relacionats amb el tractament dels sistemes químics en equilibri, com ara: 4.1. Consolidar la correcta formulació i nomenclatura dels compostos químics; 4.2. Saber portar a terme de manera idònia els càlculs estequiomètrics associats a qualsevol reacció química; 4.3. Saber aplicar correctament l'equació del gas ideal i cal-

cular a partir d'ella la concentració o la pressió parcial de cadascun dels components gasosos d'una mescla en equilibri; 4.4. Entendre el significat d'una constant d'equilibri; 4.5. Saber establir l'expressió de K_p i K_c i calcular correctament els valors d'aquestes constants, i 4.6. Saber predir els efectes que provoca un escalfament, un refredament, un canvi en la concentració o la pressió parcial d'algun dels components, o un canvi en la pressió total o una variació del volum sobre qualsevol sistema que es trobi en equilibri químic.

Referències bibliogràfiques

1. BABOR, J. A.; IBARZ, J. (1965). 7a ed. Barcelona: Marín.

Aquest text no necessita presentació. Bona part del professorat que avui dia fa docència de la química a la universitat o als centres de batxillerat el va utilitzar quan estudiava química general. En aquesta obra, les constants d'equilibri s'hi expressaven en unitats i es feia servir la reacció $I_2(g) + H_2(g) \rightleftharpoons 2HI(g)$, un dels sistemes on els ordres parcials de reacció coincideixen amb els coeficients estequiòmètrics, per deduir incorrectament l'expressió general de la constant d'equilibri K_c d'una reacció a partir de criteris cinètics.

Aquesta referència, que ha quedat desfasada amb el pas del temps, constitueix un bon exemple de llibre que, tot i que incorpora algunes incorreccions o inconveniències, ha tingut un paper molt important en la formació de diferents promocions de químics. En aquest sentit, l'autor d'aquest article vol afegir-hi que, si bé en alguns dels llibres de batxillerat consultats a l'hora d'escriure aquest article, també s'hi han pogut detectar alguns errors o inconveniències, la vàlua d'a-

quests textos es troba també fora de qualsevol discussió.

2. LEVINE, I. N. (2004). *Fisicoquímica*. 5a ed. Madrid: McGraw-Hill Interamericana de España.

3. ATKINS, P.; DE PAULA, J. (2005). *Chemistry*. 4a ed. Nova York: Oxford University Press.

Les referències 2 i 3 constitueixen dues de les obres més reconegudes en la docència universitària de la química física.

4. IUPAC (2004). *Magnituds, unitats i símbols en química física*. Barcelona: Institut d'Estudis Catalans. Secció de Ciències i Tecnologia. [Versió catalana a cura de Josep M. Costa]

En aquesta obra, s'hi adapten al català les recomanacions de la IUPAC en matèria de noms, símbols i unitats de les magnituds fisicoquímiques més comunes en química. Es complementa i s'amplia amb:

5. IUPAC (2007). *Compendi de nomenclatura de química analítica. Regles definitives de 1997*. 3 volums. Barcelona: Institut d'Estudis Catalans. Secció de Ciències i Tecnologia. [Versió catalana a cura d'Elisabeth Bosch i Salvador Alegret]

6. FREEMAN, R. D. (1985). *J. Chem. Educ.*, núm. 62, p. 681-686.

En aquest article, s'hi es pot comprovar que els valors de les magnituds termodinàmiques principals pràcticament no varien quan la pressió de l'estat estàndard passa a considerar-se 1 bar en lloc d'1 atm (criteri de la IUPAC anterior a 1982).

7. CHANG, R. (2007). *Química*. Mèxic: McGraw-Hill Interamericana.

8. ATKINS, P.; JONES, L. (2006). *Principios de química*. Buenos Aires: Médica Panamericana.

Les referències 7 i 8 constitueixen dues de les més recents i rellevants aportacions en l'àmbit de la docència de la química general.

A la referència 7, encara s'hi contempla que la pressió de l'estat estàndard és 1 atm i, per aquesta raó, les pressions parcials dels gasos en equilibri químic s'hi segueixen expressant en atm. No s'hi consideren les equacions termodinàmiques de les constants d'equilibri i s'hi treballa amb les que tradicionalment s'han fet servir en el batxillerat. S'hi relaciona K_p amb K_c , considerant $R = 0,0821 \text{ atm}\cdot\text{L}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$.

A la referència 8, ja s'hi considera que la pressió de l'estat estàndard és 1 bar i, en conseqüència, les pressions parcials dels gasos en equilibri químic s'hi expressen en bar. S'hi fan servir les expressions termodinàmiques de les constants d'equilibri, si bé, tal com es proposa en aquest article, s'acaba treballant amb les que convencionalment apareixen en els llibres de batxillerat. S'hi relaciona K_p amb K_c considerant $R = 0,083145 \text{ bar}\cdot\text{L}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$.



Francesc A. Centellas i Masuet.

Professor titular de Química Física a la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona. Desenvolupa la seva recerca al Laboratori de Ciència i Tecnologia Electroquímica dels Materials i del Medi Ambient (LCTEM), on s'estudia el tractament de contaminants emergents en aigües mitjançant processos d'oxidació química i electroquímica avançada. facentellas@ub.edu