

Utilització de simuladors en l'estudi de les característiques de les reaccions d'equilibri

José Ángel Hernández Santadaría (jherna24@xtec.cat) INS Badalona VII (Badalona)

Els simuladors permeten disposar, d'una manera ràpida i senzilla, de models de l'evolució dels sistemes químics a nivell microscòpic i macroscòpic. Les activitats que es presenten en aquest article tenen com a objectiu facilitar que l'alumnat pugui deduir les principals característiques de les reaccions d'equilibri a partir de l'anàlisi i la interpretació de les dades generades amb diferents simuladors.

Paraules clau: química, batxillerat, simuladors, reaccions reversibles, equilibri químic

Simulators allow us to have, in a quick and simple way, models of evolution of chemical systems at a microscopic and macroscopic level. The activities set forth in this article aim at facilitating the students' deduction of the main features of balance reactions by analyzing and processing the data obtained from different simulators.

Key words: high school chemistry, simulators, reversible reactions, chemical equilibrium

INTRODUCCIÓ

Un dels apartats del currículum de la matèria de química de batxillerat és l'estudi de l'equilibri de fases i de l'equilibri químic (1). Dins d'aquest apartat del currículum, com a contingut avaluable en les proves d'accés a la universitat, trobem la caracterització de l'equilibri químic.

S'utilitzen principalment dos models per a explicar l'equilibri químic en el context escolar: el model cinètic i el model termodinàmic.

El model cinètic de col·lisions planteja que perquè es produeixi una reacció química les molècules dels reactius han de xocar de manera efectiva, és a dir, amb prou energia i una orientació espacial adient.

També es pot estudiar l'equilibri químic mitjançant algunes magnituds termodinàmiques que intervenen en la reacció (energia d'activació, variació d'entalpia de la reacció). L'energia mínima per iniciar una reacció s'anomena energia d'activació. En les reaccions d'equilibri s'han de considerar les

energies d'activació de la reacció en el sentit directe (E_a) i en el sentit invers (E_a').

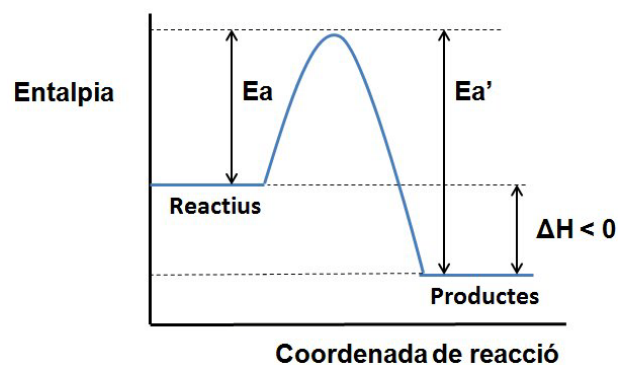


Figura 1.-Diagrama d'energia d'una reacció exotèrmica

La variació d'entalpia (ΔH) és la quantitat de calor intercanviada pel sistema quan la reacció té lloc a pressió constant. Les reaccions exotèrmiques alliberen energia en forma de calor (els productes tenen un nivell d'entalpia inferior als reactius, la variació d'entalpia és negativa) i les reaccions endo-

tèrmiques absorbeixen calor (els productes tenen un nivell d'entalpia superior als reactius, la variació d'entalpia és positiva). Els diagrames d'energia permeten visualitzar els valors de les principals magnituds termodinàmiques implicades en les reaccions.

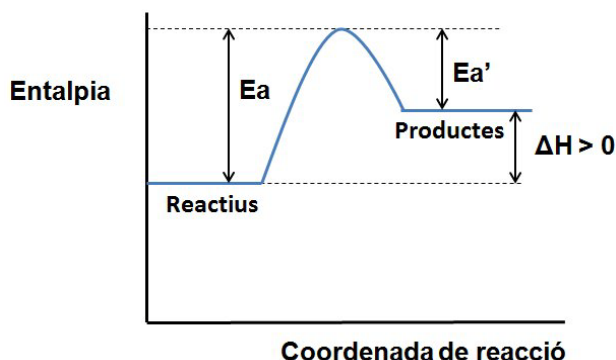


Figura 2.-Diagrama d'energia d'una reacció endotèrmica.

L'estat d'equilibri químic es caracteritza per complir una sèrie de condicions:

- L'estat d'equilibri és una situació dinàmica, ja que la reacció no s'atura sinó que continua produint-se en ambdós sentits. En un sistema en equilibri es produeixen simultàniament dues reaccions inverses.
- Una vegada s'assoleix l'estat d'equilibri les velocitats de les reaccions directa ($R \rightarrow P$) i inversa ($R \leftarrow P$) s'igualen.
- Quan s'assoleix l'estat d'equilibri, dins del recipient hi ha una barreja dels reactius inicials i dels productes de la reacció.
- Quan s'assoleix l'estat d'equilibri, les concentracions de totes les substàncies es mantenen constants amb el temps. Una vegada assolit l'equilibri també es mantenen constants els valors d'altres magnituds macroscòpiques (temperatura, pH, etc.).
- La constant d'equilibri de concentracions (K_c) és una relació entre les concentracions de tots els reactius i productes implicats en la reacció i és característica de cada sistema en equilibri. El valor de la constant d'equilibri només depèn de la temperatura en què es produeix la reacció.
- Es pot arribar a un mateix estat d'equilibri des de qualsevol dels dos extrems, és a dir, partint dels reactius o partint dels productes.
- Podem arribar al mateix estat d'equilibri independentment de les concentracions inicials de cada substància. Els valors concrets de les

concentracions dels reactius i dels productes poden variar, però no la relació entre elles (K_c).

Hem pogut constatar que, en general, l'alumnat que cursa la matèria de química de batxillerat té importants dificultats per visualitzar i comprendre les característiques de l'equilibri químic. Normalment les explicacions del professorat i els exemples que solen aparèixer en els llibres de text no resulten suficients per assegurar una adequada comprensió d'aquests continguts per part dels estudiants.

Per aquest motiu vam decidir explorar les grans possibilitats didàctiques dels simuladors i utilitzar-los per treballar aquests continguts a classe. Actualment existeix un elevat nombre de simuladors que permeten visualitzar l'evolució de les propietats dels sistemes químics a nivell microscòpic i també macroscòpic. La majoria d'aquests simuladors estan disponibles a Internet i són d'accés lliure i gratuït.

Aquest plantejament enllaça amb un altre dels objectius recollits al currículum de química de batxillerat, en l'apartat on es fa referència a la contribució de la matèria a les competències generals del batxillerat. Mitjançant la utilització de simuladors estem treballant la competència en gestió i tractament de la informació i la competència digital des de l'àmbit de la matèria de química.

OBJECTIU

Les activitats que es presenten en aquest article tenen com a objectiu facilitar que els estudiants de batxillerat puguin deduir les principals característiques de les reaccions d'equilibri a partir de l'anàlisi i la interpretació de les dades generades amb diferents simuladors.

DESCRIPCIÓ DE LES ACTIVITATS

En aquestes activitats s'utilitzen dos simuladors diferents que es complementen entre si, ja que un d'ells fa referència al model cinètic i l'altre al model termodinàmic. Aquests simuladors permeten realitzar diverses observacions a nivell microscòpic i també obtenir dades que, una vegada analitzades, permeten l'elaboració de conclusions per part de l'alumnat.

Els estudiants disposen d'un guió facilitat pel professor en el qual s'explica el procediment que han de seguir, s'indiquen les condicions inicials que han d'introduir en els simuladors i es proposen di-

verses preguntes que els guien en la recollida de dades, l'anàlisi dels resultats i l'elaboració de les conclusions. Aquest guió es pot descarregar a l'aula virtual de química ubicada en l'entorn Moodle de l'institut (2).

Per realitzar les activitats és necessari que els alumnes disposin d'ordinadors amb connexió a Internet.

És convenient que el professor faci una presentació prèvia en la qual comenti breument el funcionament dels simuladors. Per realitzar aquesta presentació resulta de gran ajuda la utilització de la pissarra digital de l'aula.

Amb una sessió de classe d'una hora hi ha prou temps per desenvolupar les dues activitats. Una vegada finalitzada la sessió, es demana que cada alumne elabori a casa seva un informe amb les dades recollides i les respostes a les preguntes plantejades en el guió.

Primera part. Simulador de reaccions reversibles

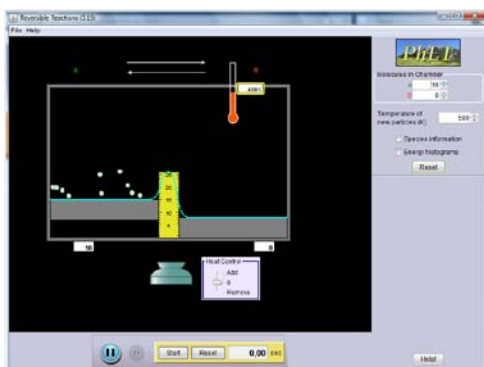


Figura 3. Simulador de reaccions reversibles.

Per a realitzar la primera part de l'activitat s'utilitza un simulador disponible al portal web *PhET Interactive Simulations* de la Universitat de Colorado (3), concretament el que es troba en l'adreça:

<http://phet.colorado.edu/en/simulation/reversible-reactions>

Podem descarregar el fitxer del simulador o executar-lo en línia.

Es proposen les següents condicions inicials per configurar el simulador:

- Nombre de molècules en el recipient: A = 10 ; B = 0
- Temperatura: 500 K
- Energia d'activació: 25 kJ

Una vegada iniciada la simulació (botó "Start"), observem amb atenció l'evolució del procés durant uns minuts.

Després es poden realitzar modificacions en la configuració i observar com afecten l'evolució del sistema. Per exemple, es pot reiniciar el sistema (botó "Reset"), augmentar el valor de l'energia d'activació (per exemple a 40 kJ), introduir més molècules del reactiu A en la cambra i, treballant a la mateixa temperatura, observar l'evolució del sistema.

Per guiar l'alumnat en l'anàlisi de les observacions realitzades, s'ha elaborat el següent qüestionari:

- Després d'un temps d'iniciar-se el procés, consideres que la reacció s'ha aturat? Què hi observes?
- Transcorreguts uns minuts, com diries que són les velocitats de la reacció directa ($A \rightarrow B$) i de la reacció inversa ($A \leftarrow B$)?
- Què passa amb la reacció estudiada quan augmentem l'energia d'activació?
- Defineix el concepte d'energia d'activació.

A partir del perfil del diagrama d'energia de la reacció reversible estudiada, podries deduir si la reacció directa és endotèrmica o exotèrmica? Quin valor té la variació d'entalpia (ΔH) del procés? R aona les teves respostes.

Segona part. Estudi de l'equilibri

$$\text{H}_2(\text{g}) + \text{I}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{HI}(\text{g})$$

Dels diferents simuladors de reaccions d'equilibri disponibles en el portal web del Departament de Química i Bioquímica de la Universitat d'Arizona (4), hem triat el corresponent a la reacció entre l'hidrogen i el iode per formar iodur d'hidrogen, accessible en l'enllaç:

<http://www.chem.arizona.edu/chemt/Flash/HI.html>

Per començar proposem als estudiants que configuren les condicions inicials del sistema amb les dades que apareixen en la figura 4 (nombre de molècules de cada espècie química, temperatura i volum). Iniciem la reacció (botó "On") i observem atentament l'evolució del sistema.

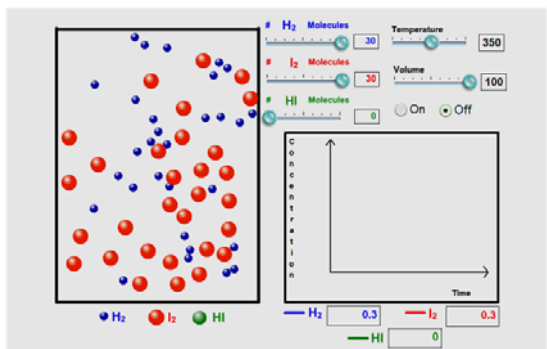


Figura 4. Condicions inicials del simulador (assaig 1)

El guió de l'activitat inclou les següents preguntes i taules que orienten les observacions i l'anàlisi de les dades que ha de realitzar l'alumnat:

- Quan s'arriba a l'estat d'equilibri quines espècies químiques hi ha en el recipient?
- Què passa amb les concentracions de les tres espècies que intervenen en la reacció quan s'assoleix l'estat d'equilibri?
- Anota les dades que falten en la taula 1:

	[H ₂] (M)	[I ₂] (M)	[HI] (M)
Inici	0,3	0,3	0,0
En l'equilibri (T = 350 °C)			

Taula 1. Taula de resultats de l'assaig 1.

A continuació es pot estudiar quin efecte té sobre l'equilibri una modificació de la temperatura. Reiniciem el simulador i configurem les condicions del sistema mantenint els mateixos valors inicials que a l'assaig anterior (nombre de molècules i volum) però elevant la temperatura del recipient (T = 500 °C). Iniciem la reacció, observem l'evolució del sistema i anotem les dades en la taula 2:

	[H ₂] (M)	[I ₂] (M)	[HI] (M)
Inici	0,3	0,3	0,0
En l'equilibri (T = 500 °C)			

Taula 2. Taula de resultats de l'assaig 2.

També podem estudiar què passa quan, en lloc d'introduir inicialment en el recipient els reactius (H₂ i I₂), hi posem només una quantitat determinada

del producte (HI). Reiniciem l'applet i configurem les condicions inicials del sistema amb les dades que apareixen en la figura 5 (nombre de molècules, temperatura i volum).

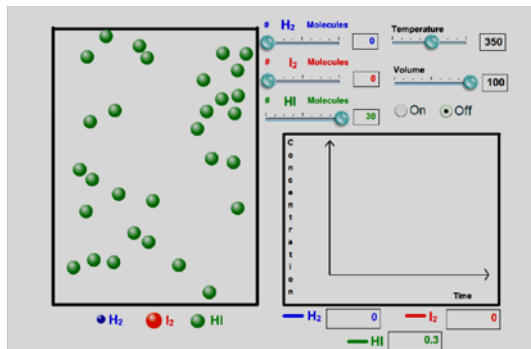


Figura 5. Condicions inicials del simulador (assaig 3)

Iniciem la reacció, observem l'evolució del sistema i anotem les concentracions corresponents a l'estat d'equilibri en la taula 3:

	[H ₂] (M)	[I ₂] (M)	[HI] (M)
Inici	0,0	0,0	0,3
En l'equilibri (T = 350 °C)			

Taula 3. Taula de resultats de l'assaig 3.

Finalment podem observar què passa si inicialment posem dins del recipient una mescla formada per la mateixa concentració de les tres substàncies (els dos reactius i el producte). Reiniciem el simulador, configurem les condicions inicials del sistema amb les dades que apareixen en la figura 6, iniciem la reacció (botó "On"), observem l'evolució del sistema i anotem en la taula 4 les concentracions de cada substància quan s'assoleix l'estat d'equilibri.

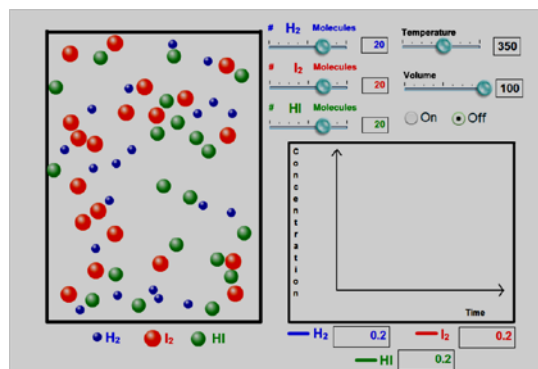


Figura 6. Condicions inicials del simulador (assaig 4).

	[H ₂] (M)	[I ₂] (M)	[HI] (M)
Inici	0,2	0,2	0,2
En l'equilibri (T = 350 °C)			

Taula 4. Taula de resultats de l'assaig 4

Per facilitar l'anàlisi de les dades recollides i l'elaboració de conclusions, es proposa que els estudiants responguin el qüestionari següent:

- A partir de les concentracions de les tres espècies en equilibri que has anotat en les taules 1 i 2, calcula el valor de la constant d'equilibri K_c per aquesta reacció a 350 °C i a 500 °C.
- Com es modifica el valor de K_c d'aquesta reacció quan augmentem la temperatura? Penses que la formació del producte (HI) es veu afavorida per aquest augment de temperatura? Això vol dir que la reacció directa és exotèrmica o endotèrmica? Raona les teves respostes.
- Amb les dades de la taula 3 (concentracions en l'equilibri) calcula de nou el valor de K_c . Compara el valor amb la K_c obtinguda amb les dades de la taula 1. A quina conclusió hi pots arribar?
- Observa les dades de la taula 4 i calcula de nou el valor de la constant d'equilibri K_c . Compara aquest valor amb les K_c obtingudes a partir de les concentracions en l'equilibri anotades a les taules 1 i 3. A quina conclusió hi pots arribar?
- A partir de les observacions, dades i càlculs que hem realitzat en les activitats anteriors podem concloure que l'estat d'equilibri químic presenta les següents característiques (completa les frases):
 - L'estat d'equilibri és una situació, ja que la reacció no s'atura

sinó que continua produint-se en ambdós sentits.

- Una vegada s'assoleix l'estat d'equilibri les velocitats de les reaccions directa ($R \rightarrow P$) i inversa ($R \leftarrow P$) són
- Quan s'assoleix l'estat d'equilibri dins del recipient hi ha una barreja dels inicials i dels de la reacció.
- Quan s'assoleix l'estat d'equilibri, les concentracions de totes les substàncies es mantenen amb el temps.
- El valor de la constant d'equilibri depèn de la en què es produeix la reacció.
- Es pot arribar a un mateix estat d'equilibri des de qualsevol dels dos extrems, és a dir, partint dels o partint dels productes.
- Podem arribar al mateix estat d'equilibri independentment de les inicials de cada substància.

REFERÈNCIES

Currículum de batxillerat. Decret 142/2008 de 29 de juliol (DOGC núm. 5183).

Aula virtual de química de l'Institut Badalona VII: <http://agora.xtec.cat/iesb7/moodle/course/view.php?id=642>

Portal web *PhET Interactive Simulations* de la Universitat de Colorado: <http://phet.colorado.edu/>

Portal web del Departament de Química i Bioquímica de la Universitat d'Arizona: <http://www.chem.arizona.edu/>

La data de consulta de tots els enllaços és el 28 de març de 2014