

Reaktiot ja tasapaino

Tasapainotilan laskennallinen käsittely

Tasapainovakion laskeminen



- Reaktion alussa A:n ja B:n konsentraatiot ovat 1,00M. Tasapainossa A:n konsentraatio on 0,30M. Laske K_c :n arvo.

$$K_c = \frac{[C]}{[A][B]}$$

	[A]	[B]	[C]
Alussa	1,00M	1,00M	0M
Muutos Δ			
Lopussa	0,30M		

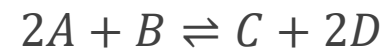
	[A]	[B]	[C]
Alussa	1,00M	1,00M	0M
Muutos Δ	-0,70M	-0,70M	+0,70M
Lopussa	0,30M		

	[A]	[B]	[C]
Alussa	1,00M	1,00M	0M
Muutos Δ	-0,70M	-0,70M	+0,70M
Lopussa	0,30M	0,30M	0,70M

$$K_c = \frac{0,70M}{0,30M \cdot 0,30M} = 7,777 \dots M^{-1}$$

$$K_c \approx 7,8M^{-1}$$

- Onko reaktio tasapainotilassa, kun K_c on 5,6 reaktiolle?



$[A]=2,00\text{M}$

$[B]=3,00\text{M}$

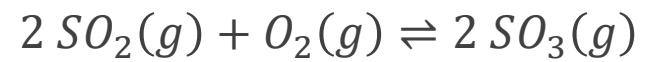
$[C]=1,00\text{M}$

$[D]=5,00\text{M}$

$$\frac{[C] \cdot [D]^2}{[A]^2 \cdot [B]} = \frac{1,00M \cdot (5,00M)^2}{(2,00M)^2 \cdot 3,00M} = \frac{25,0M^3}{12,0M^3} \approx 2,08$$

► $2,08 < K_c$

► Reaktio ei ole tasapainotilassa. Reaktio etenee reaktiotuotteiden suuntaan.



- Lämpötilan ollessa 25°C kaasujen osapaineet tasapainotilassa olivat:

$$p(\text{SO}_2) = 0,90\text{bar} \quad p(\text{O}_2) = 0,83\text{bar} \quad p(\text{SO}_3) = 4,5\text{bar}$$

- Ratkaise K_p ja K_c .

$$K_p = \frac{p(SO_3)^2}{p(O_2) \cdot p(SO_2)^2} = \frac{(4,5bar)^2}{0,83bar \cdot (0,90bar)^2} = 30,12 \dots bar^{-1}$$

$$K_p \approx 30bar^{-1}$$

- Miten saamme ratkaistua K_c :n arvon?

- Ideaalikaasun tilanyhtälön mukaan:

$$p = \frac{nRT}{V}$$

- Koska $\frac{n}{V}$ = konsentraatio, tasapainotilassa kaasuille pätee yhtälö:

$$p_{O_2} = [O_2] \cdot RT \Leftrightarrow [O_2] = \frac{p_{O_2}}{RT}$$

$$K_c = \frac{[SO_3]^2}{[O_2] \cdot [SO_2]^2} = \frac{\left[p(SO_3)/RT\right]^2}{\left[p(O_2)/RT\right] \cdot \left[p(SO_2)/RT\right]^2} = K_p \cdot RT$$

$$T = 25\text{ }^{\circ}\text{C} = 298,15\text{K}$$

$$K_c = 30,12\text{bar}^{-1} \cdot 22,41 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol}} \cdot 298,15\text{K} = 201\,248,02 \dots M^{-1}$$

$$K_c \approx 201\,000 M^{-1}$$

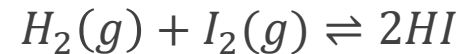
► Yleisesti:

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

missä Δn on kaasumolekyylien määrän muutosta reaktion aikana.

Tasapainoseoksen koostumuksen ratkaiseminen

- Vety ja jodi reagoivat keskenään muodostaen vetyjodidia. Reaktion tasapainovakion arvo on 50 lämpötilassa $+229\text{ }^{\circ}\text{C}$. Astiaan laitetaan 1M vetykaasua ja jodikaasua. Laske muodostuvan vetyjodidin konsentraatio tasapainotilassa.



	H_2	I_2	HI
Alussa	1,00M	1,00M	0M
Δ	?	?	?
Lopussa	?	?	?

	H_2	I_2	HI
Alussa	1,00M	1,00M	0M
Δ	-x	-x	
Lopussa	1,00M-x	1,00M-x	

	H_2	I_2	HI
Alussa	1,00M	1,00M	0M
Δ	-x	-x	+2x
Lopussa	1,00M-x	1,00M-x	2x

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H_2] \cdot [I_2]} = \frac{(2x)^2}{(1-x) \cdot (1-x)} = 50$$

$$K_c = \frac{4x^2}{1 - 2x + x^2} = 50$$

$$4x^2 = 50 \cdot (1 - 2x + x^2) = 50 - 100x + 50x^2$$

$$46x^2 - 100x + 50 = 0$$

- ▶ Toisen asteen yhtälöstä saamme kaksi ratkaisua:
 - ▶ $x_1 = 0,77951 \dots$
 - ▶ $x_2 = 1,39439 \dots$
- ▶ Koska vedyn ja jodin konsentraatio ei voi olla alle 0, x_1 on oikea arvo.
- ▶ $[H_2] = 1 - x = 0,22049 \dots \approx 0,22M$
- ▶ $[I_2] = 1 - x = 0,22049 \dots \approx 0,22M$
- ▶ $[HI] = 2x = 1,55902 \dots \approx 1,56M$