

3.1 Tasapainovakion ratkaiseminen ja reaktion suunnan ennustaminen

Esim. Eräessä lämpötilassa 2,50 litran astia sisälsi tasapainotilassa $2,40 \cdot 10^{-3}$ mol typpeä, $2,40 \cdot 10^{-4}$ mol happea ja $1,90 \cdot 10^{-2}$ mol dityppioksidia. Laske reaktion $2 \text{N}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{N}_2\text{O}(\text{g})$ tasapainovakio tässä lämpötilassa.

- Tasapainovakio on

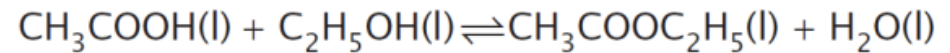
$$K = \frac{[\text{N}_2\text{O}]^2}{[\text{N}_2]^2[\text{O}_2]} = \frac{\left(\frac{0,01900\text{mol}}{2,50\text{l}}\right)^2}{\left(\frac{0,00240\text{mol}}{2,50\text{l}}\right)^2 \cdot \frac{2,40 \cdot 10^{-4}\text{mol}}{2,50\text{l}}} = 652850\text{l/mol}$$
$$\approx 6,53 \cdot 10^5\text{l/mol}$$

Reaktion tasapainovakion laskeminen jos tasapainokonsentraatioita ei tiedetä

1. Taulukoidaan kaikkien aineiden **alkukonsentraatiot**. Jos ainetta ei ole alkutilanteessa, sen alkukonsentraatioksi merkitään nolla. (jos annettu ainemäärät, lasketaan niiden konsentraatiot $c = \frac{n}{V}$)
2. Merkitään taulukkoon annetut **tasapainokonsentraatiot**
3. Merkitään taulukkoon sellaisen aineen **alku- ja tasapainokonsentraatioiden muutos**, jonka molemmat konsentraatiot tunnetaan (konsentraation pieneneminen merkitään negatiivisena ja lisääntyminen positiivisena)
4. Tasapainotetun reaktioyhtälön kertoimien avulla saadaan konsentraation muutos muille aineille
5. Konsentraatiomuutosten avulla lasketaan **tasapainokonsentraatiot** muille aineille
6. Sijoitetaan **tasapainokonsentraatiot tasapainovakion lausekkeeseen**

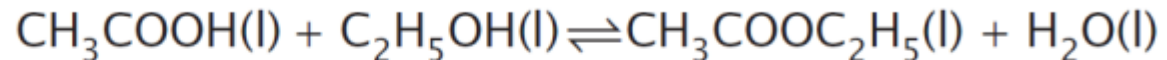
Esim. Etaanihapon ja etanolin välisessä reaktiossa syntyy etyylietanaattia ja vettä. Eräessä kokeessa lähtöaineiden alkukonsentraatiot olivat $1,00 \text{ mol/dm}^3$. Kun tasapaino oli asettunut, etaanihapon konsentraatio oli $0,33 \text{ mol/dm}^3$. Laske reaktion tasapainovakio.

- Kirjoitetaan tasapainotettu reaktioyhtälö ja taulukoidaan tehtävässä annetut konsentraatiot



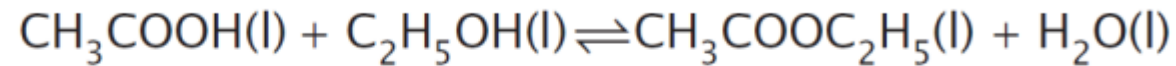
$c_{\text{alku}} \text{ (mol/dm}^3\text{)}$	1,00	1,00	0	0
muutos (mol/dm ³)				
$c_{\text{tasap.}} \text{ (mol/dm}^3\text{)}$	0,33			

- Lasketaan taulukkoon etaanihapon alku- ja tasapainokonsentraation erotus



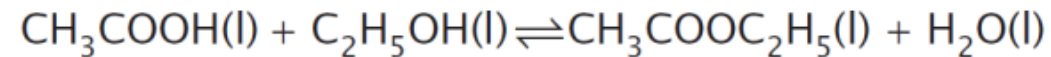
$c_{\text{alku}} \text{ (mol/dm}^3\text{)}$	1,00	1,00	0	0
muutos (mol/dm ³)	-0,67			
$c_{\text{tasap.}} \text{ (mol/dm}^3\text{)}$	0,33			

- Tasapainotetun reaktioyhtälön kertoimien avulla merkitään konsentraation muutoksen suuruus muille aineille



c_{alku} (mol/dm ³)	1,00	1,00	0	0
muutos (mol/dm ³)	−0,67	−0,67	+0,67	+0,67
$c_{\text{tasap.}}$ (mol/dm ³)	0,33			

- Lasketaan muiden aineiden tasapainokonsentraatiot



c_{alku} (mol/dm ³)	1,00	1,00	0	0
muutos (mol/dm ³)	−0,67	−0,67	+0,67	+0,67
$c_{\text{tasap.}}$ (mol/dm ³)	0,33	1,00 − 0,67 = 0,33	0,67	0,67

- Sijoitetaan tasapainokonsentraatiot tasapainovakion lausekkeeseen

$$K = \frac{[\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5][\text{H}_2\text{O}]}{[\text{CH}_3\text{COOH}][\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}]}$$
$$= \frac{(0,67 \text{ mol/dm}^3) \cdot (0,67 \text{ mol/dm}^3)}{(0,33 \text{ mol/dm}^3) \cdot (0,33 \text{ mol/dm}^3)} = 4,122 \approx 4,1$$

(HUOM! Yksiköt supistuvat pois.)

Vastaus: Reaktion tasapainovakio $K = 4,1$.

Esimerkki

Reaktion $\text{N}_2(\text{g}) + 3 \text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NH}_3(\text{g})$ tasapainovakio K_c 500 °C:ssa on $0,286 (\text{mol}/\text{dm}^3)^{-2}$. Kyseisessä lämpötilassa olevassa suljetussa yhden litran astiassa on 2,0 mol typpikaasua, 1,0 mol vetykaasua sekä 2,0 mol ammoniakkia. Kumpaan suuntaan reaktio etenee?

- Lasketaan ensin konsentraatiot:

$$[\text{N}_2] = [\text{NH}_3] = \frac{2,0 \text{ mol}}{1 \text{ dm}^3} = 2,0 \text{ mol}/\text{dm}^3$$

$$[\text{H}_2] = \frac{1,0 \text{ mol}}{1 \text{ dm}^3} = 1,0 \text{ mol}/\text{dm}^3$$

- Muodostetaan tasapainovakion lauseke ja sijoitetaan konsentraatiot siihen:

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2][\text{H}_2]^3} = \frac{\left(\frac{2,0 \text{ mol}}{l}\right)^2}{\left(\frac{2,0 \text{ mol}}{l}\right) \cdot \left(\frac{1,0 \text{ mol}}{l}\right)^3} = 2,0 \left(\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}\right)^{-2}$$

- Verrataan saatua arvoa annettuun tasapainovakion arvoon. Saatu arvo on suurempi kuin reaktiolle annettu tasapainovakion arvo ($2,0 > 0,286$), joten reaktio ei ole saavuttanut tasapainotilaa. Lopputuotteen määrän pitää vähentyä ja lähtöaineiden määrän kasvaa, jotta tasapainovakion arvoon päästäisiin. **Reaktio etenee siis vasemmalle, kohti lähtöaineita.**

Esim. Vetyä voidaan valmistaa teollisesti käsittelemällä metaania vesihöyryllä:



Kun 1,00 litran astiaan suljettiin 0,100 mol metaania ja 0,120 mol vettä ja lämpötila nostettiin 750 °C:seen, muodostui astiaan tasapainotilan asetuttua 0,270 mol vetyä,

a) Määritä reaktion tasapainovakion lauseke.

b) Määritä tasapainovakion arvo.

Ratkaisu:

a) Reaktion tasapainovakion on
$$K = \frac{[\text{H}_2]^3 [\text{CO}]}{[\text{CH}_4][\text{H}_2\text{O}]}$$

b) $n(\text{CH}_4)_{\text{alku}} = 0,100 \text{ mol}$

$n(\text{H}_2\text{O})_{\text{alku}} = 0,120 \text{ mol}$

$n(\text{H}_2)_{\text{tasapaino}} = 0,270 \text{ mol}$

$V = 1,00 \text{ l}$

- Laaditaan taulukko alku- ja tasapainokonsentraatioista.
- Koska astian tilavuus oli 1,00 litraa, tulee metaanin alkukonsentraatioksi 0,100 mol/l ja veden 0,120 mol/l. Muiden aineiden alkukonsentraatioksi merkitään 0 mol/l.
- Koska vetyä oli tasapainotilassa 0,270 moolia, on sen tasapainokonsentraatio 0,270 mol/l.

Tehdään taulukko eri aineiden alku- ja tasapainokonsentraatioista:

Suure	CH ₄ (g)	+ H ₂ O (g)	$\rightleftharpoons$	3 H ₂ (g)	+ CO (g)	yksikkö
<u>C_{alku}</u>	0,100	0,120		0	0	$\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$
C _{muutos}				+ 0,270		$\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$
<u>C_{tasapaino}</u>				0,270		$\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$

- Kun verrataan hiilimonoksidin ja vedyn kertoimia reaktioyhtälöstä, havaitaan, että hiilimonoksidia syntyy yksi mooli kolmea vetymoolia kohden.
- Siten hiilimonoksidin tasapainokonsentraatio on kolmasosa vedyn tasapainokonsentraatiosta.
- Reaktioyhtälön kertoimien avulla voidaan edelleen päätellä, kuinka paljon lähtöaineiden eli metaanin ja veden alkukonsentraatioiden tulee pienentyä.

$$\frac{n(\text{CH}_4)}{n(\text{H}_2)} = \frac{1 \text{ mol}}{3 \text{ mol}} \Rightarrow n(\text{CH}_4) = \frac{1}{3} \cdot n(\text{H}_2), \quad \frac{n(\text{H}_2\text{O})}{n(\text{H}_2)} = \frac{1 \text{ mol}}{3 \text{ mol}} \Rightarrow n(\text{H}_2\text{O}) = \frac{1}{3} \cdot n(\text{H}_2),$$

$$\frac{n(\text{CO})}{n(\text{H}_2)} = \frac{1 \text{ mol}}{3 \text{ mol}} \Rightarrow n(\text{CO}) = \frac{1}{3} \cdot n(\text{H}_2).$$

- Molemmat lähtöaineet pienenevät saman verran kuin hiilimonoksidin konsentraatio kasvaa eli 0,0900 mol/l. Näiden tietojen avulla voidaan laskea metaanin ja veden tasapainokonsentraatiot.

Suure	$\text{CH}_4(\text{g})$	+	$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	$\rightleftharpoons$	$3 \text{H}_2(\text{g})$	+	$\text{CO}(\text{g})$	yksikkö
c_{alussa}	0,100		0,120		0		0	$\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$
c_{muutos}	$-\frac{1}{3} \cdot 0,270$ $= -0,0900$		$-\frac{1}{3} \cdot 0,270$ $= -0,0900$		+ 0,270		$+\frac{1}{3} \cdot 0,270$ $= +0,0900$	$\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$
$c_{\text{tasapaino}}$	$0,100 - 0,0900$ $= 0,0100$		$0,120 - 0,0900$ $= 0,0300$		0,270		0,0900	$\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$

Sijoitetaan lasketut tasapainokonsentraatiot reaktion tasapainovakion lausekkeeseen, jolloin saadaan

$$K = \frac{[\text{H}_2]^3 [\text{CO}]}{[\text{CH}_4] [\text{H}_2\text{O}]} = \frac{(0,270 \text{ mol/l})^3 \cdot (0,0900 \text{ mol/l})}{(0,0100 \text{ mol/l}) \cdot (0,0300 \text{ mol/l})} = 5,9049 (\text{mol/l})^2 \approx \underline{\underline{5,90 \text{ mol}^2/\text{l}^2}}$$

KATSO kirjan esimerkit 4 ja 5 (s. 85-88) miten tasapainovakio lasketaan kaasujen osapaineiden avulla.