

Dr. Hornyánszky Gábor

egyetemi docens

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Egyensúlyi folyamatok számítása 2

Alapfogalmak:

- Az egyensúly definíciója
- A tömeghatás törvénye
- Az egyensúlyi állandó (K_c)
- Az egyensúly eltolása
- A Le Chatelier–Braun-elv
- A számítás menete

1. feladat (emelt szintű érettségi, 2007. október, 5. feladat)

Egyensúlyi folyamatok

A kén-trioxid keletkezése kén-dioxidból egyensúlyra vezető folyamat:



Válaszoljon az alábbi kérdésekre! Válaszát minden esetben indokolja!

a) Hogyan változnak a reagáló anyagok egyensúlyi koncentrációi, ha az egyensúlyban levő gázelegy hőmérsékletét tovább emeljük?

b) Hogyan változnak a reagáló anyagok egyensúlyi koncentrációi, ha állandó térfogaton növeljük a nyomást?

1. feladat (emelt szintű érettségi, 2007. október, 5. feladat)

c) A reakció kezdetén katalizátort adunk a kiindulási gázelegyhez. Hogyan változnak a reagáló anyagok egyensúlyi koncentrációi a katalizátor alkalmazása nélküli esethez képest?

d) Egy kísérlet során $0,500 \text{ mol/dm}^3$ kiindulási kén-dioxid- és $0,500 \text{ mol/dm}^3$ kiindulási oxigénkoncentráció esetén zárt, állandó térfogatú tartályban, adott hőmérsékleten kialakuló egyensúlyban a kén-trioxid egyensúlyi koncentrációja: $[\text{SO}_3] = 0,300 \text{ mol/dm}^3$.

Számítsa ki, hány százalékos a kén-dioxid, illetve az oxigén átalakulása, és mekkora az adott hőmérsékleten az egyensúlyi állandó!

Megoldás

a) A SO_2 és O_2 koncentrációja nő, a SO_3 koncentrációja csökken.
Hőmérsékletnövelés hatására az egyensúlyban lévő rendszer az endoterm reakció irányába tolódik.

b) A SO_2 és O_2 koncentrációja csökken, a SO_3 koncentrációja nő.
A nyomás növelésére az egyensúlyi rendszer az anyagmennyiség-csökkenés irányába tolódik.

c) Az egyensúlyi összetétel nem változik.
A katalizátor az egyensúlyi koncentrációkat nem befolyásolja.

Megoldás

d) A kén-dioxid egyensúlyi koncentrációjából:



Kiindulási állapot	0,5	0,5	0
<u>Átalakulás</u>	<u>-2z</u>	<u>-z</u>	<u>2z</u>
Egyensúly	0,5-2z	0,5-z	2z

Az egyensúlyi $[\text{SO}_3] = 0,300 \text{ mol/dm}^3$, $2z = 0,3$, $z = 0,15$

Az átalakult SO_2 $2z = 0,300 \text{ mol/dm}^3$

Az átalakult O_2 $z = 0,150 \text{ mol/dm}^3$

Megoldás

Az átalakulás mértéke:

SO_2 : $0,300 / 0,500 = 0,600$, ami 60,0 százalék

O_2 : $0,150 / 0,500 = 0,300$, ami 30,0 százalék

Az egyensúlyi koncentrációk:

$[\text{SO}_2] = (0,500 - 0,300) \text{ mol/dm}^3 = 0,200 \text{ mol/dm}^3$

$[\text{O}_2] = (0,500 - 0,150) \text{ mol/dm}^3 = 0,350 \text{ mol/dm}^3$

Az egyensúlyi állandó:

$K = [\text{SO}_3]^2 / ([\text{SO}_2]^2 \cdot [\text{O}_2])$

$K = 0,300^2 / (0,200^2 \cdot 0,350) = 6,43 \text{ dm}^3/\text{mol}$

2. feladat (emelt szintű érettségi, 1999. V/4. feladat)

A $\text{H}_2(\text{g}) + \text{I}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{HI}(\text{g})$ reakció egyensúlyi állandója 400°C -on $K=200$. Ezen a hőmérsékleten $2,00 \text{ dm}^3$ térfogatú légüres edénybe $0,0800 \text{ mol}$ hidrogént, $0,0800 \text{ mol}$ I_2 -gőzt és $0,600 \text{ mol}$ HI -gázt vezetünk be.

Indokolja meg (számítással alátámasztva), milyen irányú reakció várható! Számítsa ki a reakcióban részt vevő anyagok koncentrációját az egyensúly beállta után!

Mekkora az edényben a gázok együttes nyomása a reakció kezdetén, illetve az egyensúly beállása után? $R=8,314 \text{ J/mol}^{-1}\text{K}^{-1}$

Megoldás

A 2,00 dm³-es edényben a kezdeti koncentrációk:

$[H_2] = 0,0400 \text{ mol/dm}^3$; $[I_2] = 0,0400 \text{ mol/dm}^3$; $[HI] = 0,300 \text{ mol/dm}^3$

A folyamat egyensúlyi állandója: $K = [HI]^2 / ([H_2][I_2]) = 200$

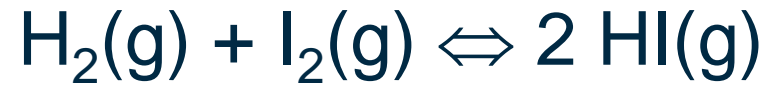
A kiindulási koncentrációkat helyettesítve:

$0,300^2 / (0,04 \times 0,04) = 56,25 < K$

A $K = 200$ érték a HI keletkezésével, vagyis a H_2 és I_2 koncentrációjának csökkenésével érhető el.

A reakció tehát HI keletkezésének irányába megy végbe.

Megoldás



Kiindulási állapot	0,04	0,04	0,3
<u>Átalakulás</u>	<u>-x</u>	<u>-x</u>	<u>2x</u>
Egyensúly	0,04-x	0,04-x	0,3+2x

$$K = [\text{HI}]^2 / ([\text{H}_2][\text{I}_2]) = 200$$

$$K = (0,3+2x)^2 / (0,04-x) \times (0,04-x) = 200$$

Az egyenletet megoldva: $x_1 = 0,0713$, $x_2 = 0,0165$.

Az x_1 -et felhasználva negatív koncentrációt kapunk, tehát csak az x_2 igaz, ekkor az egyensúlyi koncentrációk:

$$[\text{HI}] = 0,333 \text{ mol/dm}^3; [\text{H}_2] = [\text{I}_2] = 0,0235 \text{ mol/dm}^3$$

Megoldás

A gázok anyagmennyisége a reakció kezdetén:

$$n = (0,080 + 0,080 + 0,600) \text{ mol} = 0,760 \text{ mol.}$$

Nyomása: $p = nRT / V$

$$p = 0,760 \text{ mol} \times 8,314 \text{ J/mol}^{-1}\text{K}^{-1} \times 673 \text{ K} / 0,0020 \text{ m}^3$$

$$p = 2,126 \times 10^6 \text{ Pa} = 2,126 \text{ MPa.}$$

A reakció során az anyagmennyiség nem változik, ezért a nyomás az egyensúly beállta után változatlan.

3. feladat (emelt szintű érettségi, 2015. május, 7. feladat)

Egy $10,0 \text{ dm}^3$ -es, állandó térfogatú tartályt megfelelő hőmérsékleten 387 gramm hexán gázzal töltünk meg, majd a lezárt tartályt $700 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra melegítjük. Ekkor a hexán benzolra és hidrogénre disszociál.

- a) Írja fel a hexán termikus disszociációjának rendezett egyenletét!**
- b) Számítsa ki $700 \text{ }^\circ\text{C}$ -on a folyamat egyensúlyi állandóját, ha tudjuk, hogy a hexán $80,0\%$ -a disszociált!**
- c) Határozza meg az egyensúlyi elegy nyomását!**

3. feladat (emelt érettségi 2015. május, 7. feladat)

d) Egy másik kísérletben ugyanabba a tartályba ismét 387 g hexánt töltöttünk, de ezúttal valamekkora tömegű benzolt is kevertünk hozzá, majd így melegítettük fel 700 °C-ra a rendszert. Ekkor a hexán 60,0%-a alakult át. Hány gramm benzolt kevertünk a hexánhoz?

Megoldás

a) A termikus disszociáció egyenlete: $\text{C}_6\text{H}_{14} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_6 + 4 \text{H}_2$

b) $n(\text{C}_6\text{H}_{14}) = 387 \text{ g} : 86,0 \text{ g/mol} = 4,50 \text{ mol}$

$c(\text{C}_6\text{H}_{14}) = 4,50 \text{ mol} : 10,0 \text{ dm}^3 = 0,450 \text{ mol/dm}^3$

A 80,0%-os átalakulás miatt az egyensúlyi koncentrációk:

$[\text{C}_6\text{H}_{14}] = 0,2 \cdot 0,450 = 0,0900 \text{ mol/dm}^3$

$[\text{C}_6\text{H}_6] = 0,8 \cdot 0,450 = 0,360 \text{ mol/dm}^3$

$[\text{H}_2] = 4 \cdot (0,8 \cdot 0,450) = 1,44 \text{ mol/dm}^3$

Az egyensúlyi állandó helyes kifejezése:

$K = [\text{C}_6\text{H}_6][\text{H}_2]^4 / [\text{C}_6\text{H}_{14}] = (0,36 \cdot 1,44^4) : 0,09 = 17,2 \text{ (mol/dm}^3)^4$

Megoldás

c) A gáztörvény szerint $pV = nRT$, $p = (n/V)RT = cRT$

$$\Sigma c = 0,09 + 0,36 + 1,44 = 1,89 \text{ mol/dm}^3$$

$$p = \Sigma c \cdot R \cdot T = 1,89 \text{ mol/dm}^3 \cdot (8,314 \text{ J/mol.K}) \cdot 973 \text{ K}$$

$$p = 15289 \text{ kPa} = 15,3 \text{ MPa}$$

Megoldás

d) Írjuk fel a szokásos táblázatot:



Kiindulási állapot	0,45	y	0
<u>Átalakulás</u>	<u>-x</u>	<u>x</u>	<u>4x</u>
Egyensúly	0,45-x	y+x	4x

Az átalakulás mértéke 60%.

$$0,45-x = 0,4 \cdot 0,45, \text{ ahonnan } x = 0,27 \text{ mol/dm}^3$$

Megoldás

Tehát az egyensúlyi koncentrációk:

$$[\text{C}_6\text{H}_6] = 0,6 \cdot 0,450 + y = (0,270 + y) \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{C}_6\text{H}_{14}] = 0,4 \cdot 0,450 = 0,180 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{H}_2] = 4 \cdot (0,6 \cdot 0,450) = 1,08 \text{ mol/dm}^3$$

Az egyensúlyi állandóba behelyettesítve:

$$[\text{C}_6\text{H}_6][\text{H}_2]^4 / [\text{C}_6\text{H}_{14}] = 17,2 = [(0,27 + y) \cdot 1,08^4] : 0,18$$

$$y = 2,01 \text{ mol/dm}^3$$

$$m(\text{C}_6\text{H}_6) = 10,0 \text{ dm}^3 \cdot 2,01 \text{ mol/dm}^3 \cdot 78,0 \text{ g/mol} = 1567,8 \text{ g}$$

4. feladat (emelt szintű érettségi, 2008. május, 9. feladat)

Az A és B gázok az alábbi egyensúlyra vezető kémiai egyenlet szerint reagálnak egymással:



1,00 dm³-es zárt tartályban 2,00 mol A gázt és 4,00 mol B gázt elegyítünk, majd beindítjuk a reakciót. Az A gázra nézve az átalakulás 50,0 százalékos.

a) Számítsa ki, hány százalékos az átalakulás a B gázra nézve!

b) Számítsa ki mind a négy anyag egyensúlyi koncentrációját és a folyamat egyensúlyi állandóját!

4. feladat (emelt szintű érettségi, 2008. május, 9. feladat)

c) Az egyensúlyi rendszer térfogatát a felére csökkentjük, miközben a D gáz anyagmennyisége 30,0 százalékkal megnő. Számítsa ki az egyes anyagok új egyensúlyi koncentrációit!

d) Az eddigi adatok alapján eldönthető-e, hogy a térfogattal együtt a hőmérsékletet is megváltoztattuk-e? Válaszát indokolja!

Megoldás

a) Írjuk fel a szokásos táblázatot:

	$2 A$	$+ 3 B$	$\Leftrightarrow C$	$+ 2 D$
Kiindulási állapot	2	4	0	0
Átalakulás	$-2x$	$-3x$	x	$2x$
Egyensúly	$2-2x$	$4-3x$	x	$2x$

Az átalakulás mértéke az A gázra nézve 50%.

$$2x = 0,5 \cdot 2, \text{ ahonnan } x = 0,5 \text{ mol/dm}^3$$

Így a B gázból 1,5 mol alakul át, ami 37,5%-os átalakulás.

Megoldás

b) A táblázat alapján az egyensúlyi koncentrációk:

$$[A] = 1,00 \text{ mol/dm}^3; \quad [B] = 2,50 \text{ mol/dm}^3;$$

$$[C] = 0,500 \text{ mol/dm}^3; \quad [D] = 1,00 \text{ mol/dm}^3;$$

Az egyensúlyi állandó:

$$K = ([C] \cdot [D]^2) / ([A]^2 \cdot [B]^3)$$

$$K = 0,032 = 3,20 \cdot 10^{-2} \text{ dm}^6 / \text{ mol}^2$$

Megoldás

c) Vizsgáljuk meg az egyenletet, illetve alkossuk újra a táblázatot az új adatokkal (az edény térfogata $0,5 \text{ dm}^3$):



Kiindulási állapot	4	8	0	0
--------------------	---	---	---	---

<u>Átalakulás</u>	<u>-2x</u>	<u>-3x</u>	<u>x</u>	<u>2x</u>
-------------------	------------	------------	----------	-----------

Egyensúly	4-2x	8-3x	x	2x
-----------	------	------	---	----

Keletkezett D gáz mennyisége $1,3 \text{ mol}$ (30%-kal több).

$$[D] = 2,6 \text{ mol/dm}^3; \quad 2x = 2,6; \quad x = 1,3 \text{ mol/dm}^3$$

Megoldás

A táblázat alapján az új egyensúlyi koncentrációk:

$$[A] = 1,40 \text{ mol/dm}^3; \quad [B] = 4,10 \text{ mol/dm}^3;$$

$$[C] = 1,30 \text{ mol/dm}^3; \quad [D] = 2,60 \text{ mol/dm}^3;$$

d) Igen, eldönthető. Az új koncentrációkkal ki kell számolni az egyensúlyi állandót. Ha változott az értéke, akkor a hőmérsékletnek is változnia kellett.

$$K = ([C] \cdot [D]^2) / ([A]^2 \cdot [B]^3) = 1,3 \cdot 2,6^2 / 1,4^2 \cdot 4,1^3$$

$K = 0,065 = 6,50 \cdot 10^{-2} \text{ dm}^6/\text{mol}^2$, tehát változott a hőmérséklet.

Köszönöm a figyelmet!