

Dr. Hornyánszky Gábor

egyetemi docens

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Egyensúlyi folyamatok számítása

Bevezető

Az egyensúlyi feladatok megoldásánál nagyon fontos az alábbi táblázat elkészítése:

	$A + B \leftrightarrow C + D$			
Kiindulási állapot:	1	1	0	0
<u>Átalakulás</u>	<u>-x</u>	<u>-x</u>	<u>x</u>	<u>x</u>
Egyensúly	1-x	1-x	x	x

Az egyensúlyi állandó: $K = \frac{[C] \cdot [D]}{[A] \cdot [B]} = \frac{x^2}{(1-x)^2}$

A táblázatban célszerű rögtön koncentráció egységeket szerepeltetni!

Bevezető

A táblázatot lehet mólszámokkal is kitölteni, ez esetben azonban nagyon kell vigyázni az egyensúlyi állandó felírásnál, hiszen abban koncentrációk szerepelnek. Ha a reakció nem jár mólszám-változással, akkor a hatványkitevők egyezősége miatt az egyensúlyi állandó mólszámokkal is felírható. (Azonos a térfogat, amivel lehet egyszerűsíteni.)

$$K = \frac{[C]*[D]}{[A]*[B]} = \frac{(n_C/V)*(n_D/V)}{(n_A/V)*(n_B/V)} = \frac{(n_C)*(n_D)}{(n_A)*(n_B)}$$

Bevezető

Ammónia szintézis esetében a táblázat a következőképpen néz ki, ha 1:2 mólarányú nitrogén-hidrogén gázkeverékből indulunk ki és a térfogat 1 dm^3 .

	$\text{N}_2 (\text{g}) + 3 \text{H}_2 (\text{g}) \leftrightarrow 2 \text{NH}_3 (\text{g})$		
Kiindulási állapot:	1	2	0
Átalakulás	-x	-3x	2x
Egyensúly	1-x	2-3x	2x

$$K = \frac{(2x)^2}{(1-x)^1(2-3x)^3}$$

Bevezető

Az egyes feladatok során x kiszámítására több módszer is szóba jöhet, ahogy a feladat ezt meghatározza. Például a fenti általános példában, ha ismerjük a K értékét x egy másodfokú egyenlet megoldásával meghatározható. Az ammónia szintézis esetében ez így jóval bonyolultabb lenne (negyedfokú egyenlet), ezért nagy valószínűséggel a feladatban x egyszerűbb módszerekkel meghatározható, majd ez után például az egyensúlyi állandó kiszámítható.

1. feladat

NOCl-t, NO-t és Cl₂ gázt elegyítettünk 35,0 °C-on egy tartályban. A következő reakció játszódott le és egyensúly állt be.



Az alábbi egyensúlyi koncentrációkat mértük:

$$[\text{Cl}_2] = 3,04 \cdot 10^{-1} \text{ mol/dm}^3, [\text{NO}] = 8,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{NOCl}] = 7,92 \cdot 10^{-1} \text{ mol/dm}^3$$

Számítsuk ki K értékét!

Megoldás:
$$K = \frac{[\text{NO}]^2 \cdot [\text{Cl}_2]}{[\text{NOCl}]^2} = \frac{0,008^2 \cdot 0,304}{0,792^2} = 3,10 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$$

2. feladat

A foszfor-pentaklorid – PCl_5 – gőzfázisban foszfor-triklorid keletkezése közben bomlik. **Számítsuk ki a komponensek egyensúlyi koncentrációit**, ha $K = 0,800$ $340\text{ }^\circ\text{C}$ -on, és a kezdeti PCl_5 mennyisége $0,120$ mol volt az $1,00\text{ dm}^3$ térfogatú palackban.

Megoldás

	PCl_5	\rightleftharpoons	PCl_3	+	Cl_2
K	0,12		0		0
Á	-x		x		x
<hr/>					
E	0,12 -x		x		x

$$K = \frac{[\text{PCl}_3] \cdot [\text{Cl}_2]}{[\text{PCl}_5]} = \frac{x^2}{(0,12-x)} = 0,8; \text{ ebből } x_1 < 0; x_2 = 0,106 \text{ mol/dm}^3$$

Ez alapján

$$[\text{Cl}_2] = [\text{PCl}_3] = 0,106 \text{ mol/dm}^3$$

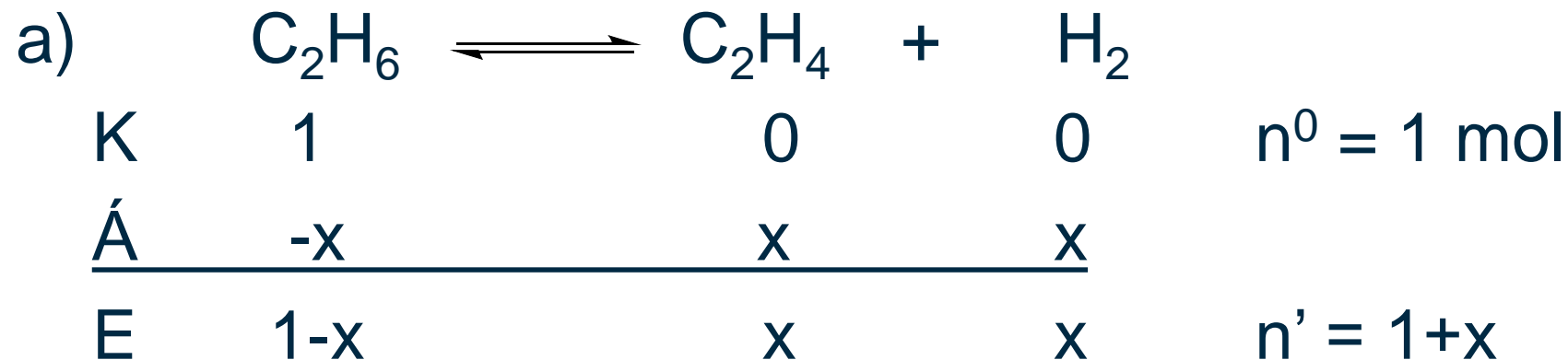
$$[\text{PCl}_5] = 0,12 - 0,106 = 0,014 \text{ mol/dm}^3$$

3. feladat

A $\text{C}_2\text{H}_6 (\text{g}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 (\text{g}) + \text{H}_2 (\text{g})$ folyamat egyensúlyra vezet. Zárt, $20\text{ }^\circ\text{C}$ -os tartályt megtöltünk 1 mol $250,0\text{ kPa}$ nyomású etángázzal (C_2H_6). Ezután $1227\text{ }^\circ\text{C}$ -ra melegítjük a rendszert. Ekkor a nyomás $2,457\text{ MPa}$ növekszik.

- Mekkora az etán disszociációfoka? (α)
- Mekkora $1227\text{ }^\circ\text{C}$ -on a folyamat egyensúlyi állandója (K_c) ?
- Hogyan változik meg az etán disszociációfoka és a nyomás, ha az $1227\text{ }^\circ\text{C}$ -on egyensúlyi gázelegy térfogatát, állandó hőmérsékleten a kétszeresére növeljük?

Megoldás



Mólszámokkal felírva a táblázatot.

$$n = \frac{p^*V}{R^*T} \rightarrow \frac{n'}{n^0} = \frac{\frac{p'^*V}{R^*T'}}{\frac{p^0*V}{R^*T^0}} = \frac{\frac{p'}{T'}}{\frac{p^0}{T^0}} = \frac{\frac{2457\text{kPa}}{1500\text{K}}}{\frac{250\text{kPa}}{293\text{K}}} = 1,92 \rightarrow n' = 1,92 \text{ mol}$$

$$1-x+2x = 1,92 \text{ mol} \rightarrow x = 0,92 \text{ mol} \rightarrow \alpha = x/n^0 = 0,92$$

Megoldás

b) Az egyensúlyi állandó kiszámításához szükség van a pontos térfogatra, hiszen azt a koncentrációkkal kell meghatározni. Ezt a gáztörvény segítségével tudjuk kiszámítani:

$$p'V = n'RT' \quad 2457 \cdot V = 1,92 \cdot 8,314 \cdot 1500 \quad V = 9,744 \text{ dm}^3$$

$$\text{Innen a koncentrációk: } [C_2H_4] = [H_2] = x/V = 0,0944 \text{ mol/dm}^3$$

$$[C_2H_6] = (1-x)/V = 0,0082 \text{ mol/dm}^3$$

$$K_c = \frac{(x/V)^2}{(1-x)/V} = \frac{0,0944^2}{0,0082} = \mathbf{1,0867 \text{ mol/dm}^3}$$

Megoldás

c) A térfogat növelése miatt a rendszer nyomása csökkenne, ezért olyan folyamatok indulnak meg, amik a nyomás növekedését eredményezik. Az etán disszociációfoka nő, míg a nyomás csökken, de nem csökken a kiindulási nyomás a felére, mert közben eltolódik az egyensúly, és megnövekszik a molekulák száma.

Az új térfogat: $V' = 2 \cdot V = 19,49 \text{ dm}^3$

Az új mólszámokat az egyensúlyi állandó segítségével határozhatjuk meg. (Értéke nem változott, mert a hőmérséklet állandó.)

Megoldás

$$K_c = \frac{(x'/V')^2}{(1-x')/V'} = \frac{(x')^2}{(1-x')} * (1/V') \quad K_c * V' = \frac{(x')^2}{(1-x')} \quad x' = 0,957 \text{ mol}$$

Ez alapján $\alpha' = x'/n^0 = 0,957$ (korábban $\alpha = 0,92$ volt)

Az új összmólszám : $n'' = 1+x' = 1,957$ mól

Ebből a nyomás

$$p'' = n'' * R * T / V' \quad p'' = 1252,2 \text{ kPa} = 1,2522 \text{ MPa}$$

(Az egyensúlyi nyomás fele 1,2285 MPa lenne.)

4. feladat (emelt érettségi 2009. október, 8. feladat)

Zárt tartályban hidrogén- és nitrogéngázból 350 °C-on, katalizátor jelenlétében ammóniát állítunk elő. Az egyensúlyi rendszerben kialakult koncentrációk a következők:

$$[\text{H}_2] = 3,60 \text{ mol/dm}^3, [\text{N}_2] = 1,20 \text{ mol/dm}^3, [\text{NH}_3] = 0,540 \text{ mol/dm}^3.$$

- Mekkora az egyensúlyi állandó értéke?**
- A bemért nitrogén, illetve hidrogén hány százaléka alakult át?**
- Számítsa ki az egyensúlyi gázelegy nyomását!**
- Mekkora volt a tartály térfogata, ha 1,00 kg ammóniát sikerült előállítanunk?**

Megoldás

a) Az egyensúlyi állandó a koncentrációk ismeretében számítható:

$$K = \frac{[NH_3]_e^2}{[H_2]_e^3 \cdot [N_2]_e} = \frac{(0,54)^2}{(3,60)^3 (1,20)^1} = 5,21 \cdot 10^{-3} \text{ (mol/dm}^3\text{)}^{-2}$$

b) Az átalakulás mértékének kiszámításához szükség lesz a kiindulási koncentrációk meghatározására.

Írjuk fel a szokásos táblázatot az ismert értékek felhasználásával.

Megoldás



Kiindulási állapot:

$$x \qquad y \qquad 0$$

Átalakulás

$$-z \qquad -3z \qquad 2z$$

Egyensúly

$$1,20 \qquad 3,60 \qquad 0,54$$

A táblázat alapján $2z=0,54$, innen $z=0,27$.

$$[\text{N}_2] : x-z=1,20, x-0,27=1,20, [\text{N}_2]_{\text{kiind}} = x = 1,47 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{H}_2] : y-3z=3,60, y-0,81=3,60, [\text{H}_2]_{\text{kiind}} = y = 4,41 \text{ mol/dm}^3$$

Megoldás

Az átalakulás mértéke:

$$[\text{N}_2] : z/x = 0,27/1,47 = 0,184, \text{ azaz } \mathbf{18,4\%}.$$

$$[\text{H}_2] : 3z/y = 0,81/4,41 = 0,184, \text{ azaz } \mathbf{18,4\%}.$$

c) A gázelegy nyomása: $p = nRT/V$

Miután ismerjük a koncentrációkat, legyen a térfogat 1 dm^3 .

Így az összmólszám $n = 5,34 \text{ mol}$.

$$\text{Innen } \mathbf{p = 5,34 * 8,314 * 623 = 27659 \text{ kPa} = 27,66 \text{ MPa}}$$

Megoldás

d) 1 dm³-es tartályban 0,54 mol, vagyis 9,18 g ammóniát állítottunk volna elő.

1 kg ammónia előállításához így:

$$V = 1000 / 9,18 = \mathbf{109 \text{ dm}^3} \text{ –es tartályra volt szükség.}$$

Köszönöm a figyelmet!