

# Az egyensúly

- 6'-1 Dinamikus egyensúly
- 6'-2 Az egyensúlyi állandó
- 6'-3 Az egyensúlyi állandókkal kapcsolatos összefüggések
- 6'-4 Az egyensúlyi állandó számértékének jelentősége
- 6'-5 A reakció hányados,  $Q$ : a várható kémiai reakció irányának megjósolása

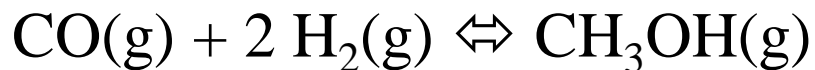
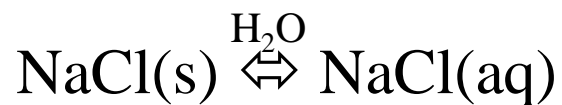
# Az egyensúly

6'-6 Az egyensúly körülményeinek megváltozása:  
Le Châtelier elv

- *Fókusz: A nitrogén ciklus, nitrogén vegyületek szintézise*

# 6'-1 Dinamikus egyensúly

- Egyensúly – Két ellentétes folyamat játszódik le azonos sebességgel.

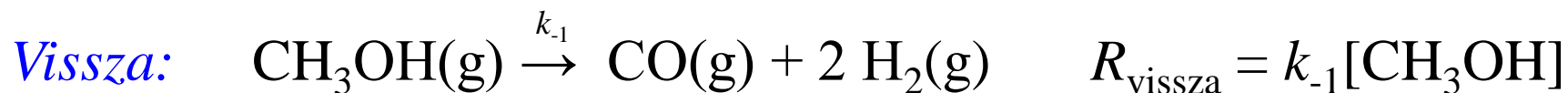


(a)

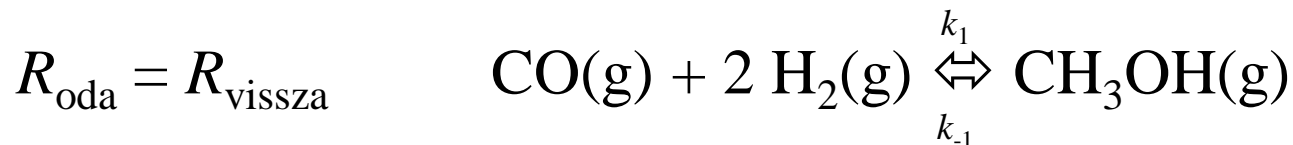
(b)



## 6'-2 Az egyensúlyi állandó



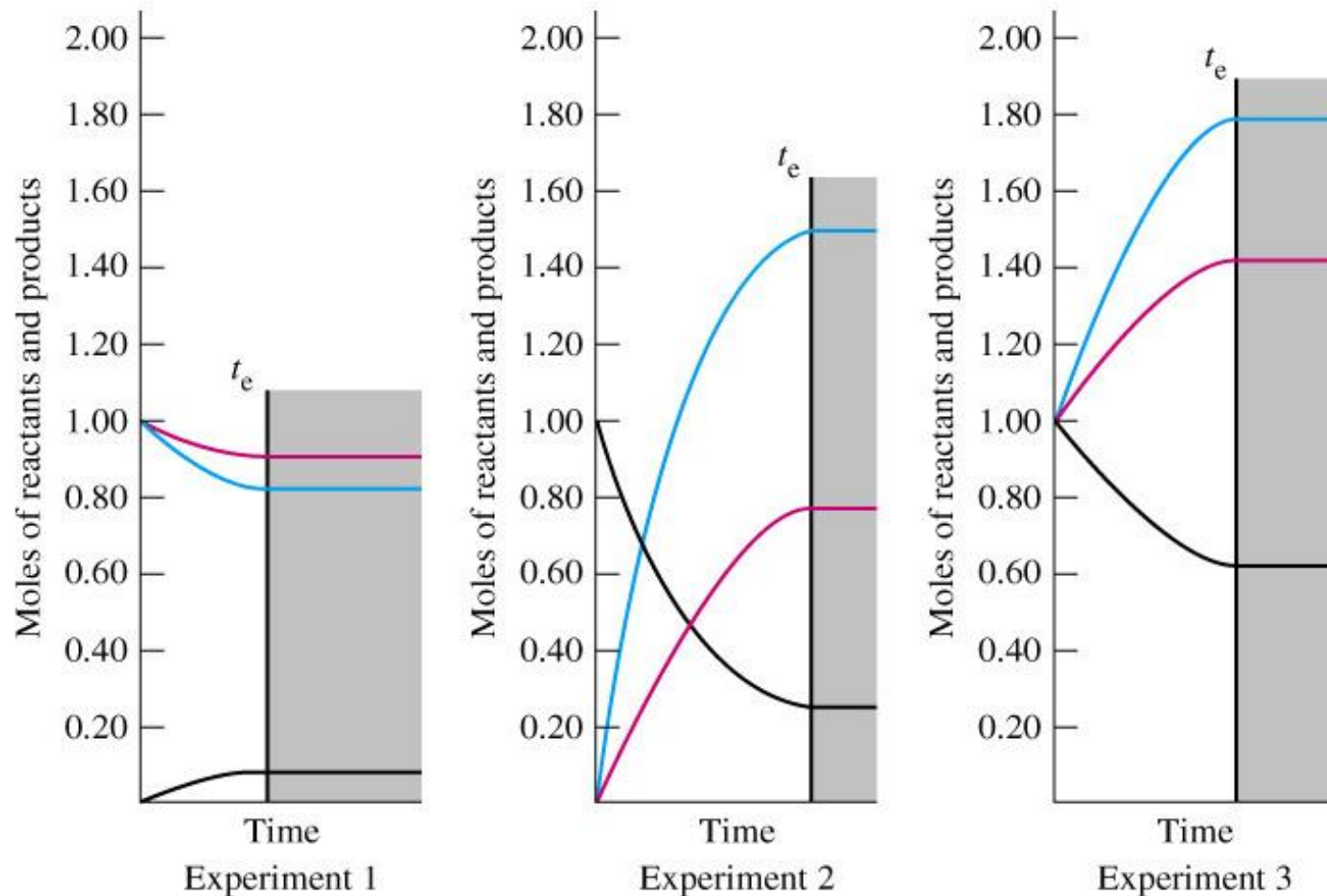
*Egyensúlyban:*



$$k_1[\text{CO}][\text{H}_2]^2 = k_{-1}[\text{CH}_3\text{OH}]$$

$$\frac{k_1}{k_{-1}} = \frac{[\text{CH}_3\text{OH}]}{[\text{CO}][\text{H}_2]^2} = K_c$$

# Három kiindulási helyzet:



$t_e$  = time for equilibrium to be reached

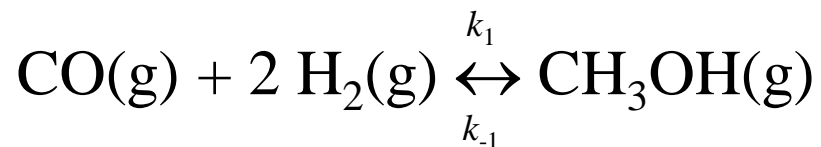
— mol CO

— mol H<sub>2</sub>

— mol CH<sub>3</sub>OH

$V=10 \text{ l}, T = 483 \text{ K}$

# A három reakció eredménye



A reakcióelegyek összetétele

a reakciók lejátszódása után (M)

$$K_c = \frac{[\text{CH}_3\text{OH}]}{[\text{CO}][\text{H}_2]^2}$$

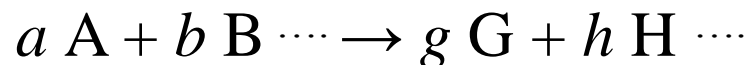
CO(g)	H <sub>2</sub> (g)	CH <sub>3</sub> OH(g)
0.0911	0.0822	0.00892
0.0753	0.1510	0.0247
0.1380	0.1760	0.0620

$$K_{c(1)} = 14.2 \text{ M}^{-2}$$

$$K_{c(2)} = 14.2 \text{ M}^{-2}$$

$$K_{c(3)} = 14.2 \text{ M}^{-2}$$

# Általános kifejezés



$$\text{Egyensúlyi állandó} = K_c = \frac{[G]^g [H]^h \cdots}{[A]^a [B]^b \cdots}$$

Termodinamikai

$$\text{Egyensúlyi állandó} = K_{\text{eq}} = \frac{(a_G)^g (a_H)^h \cdots}{(a_A)^a (a_B)^b \cdots}$$

$$a_B = \frac{[B]}{c_B^0} = \gamma_B [B] \quad c_B^0 \text{ standard referencia állapot} \\ = 1 \text{ mol } \ell^{-1} \text{ (ideális eset)}$$

## 6'-3 Az egyensúlyi állandókkal kapcsolatos összefüggések

- A reakció irányának megfordítása a  $K$  *invertálását* eredményezi.

$$-1x \rightarrow \frac{1}{K}$$

- A reakció egyenlet egy konstanssal történő beszorzása az egyensúlyi állandó megfelelő hatványozását eredményezi.

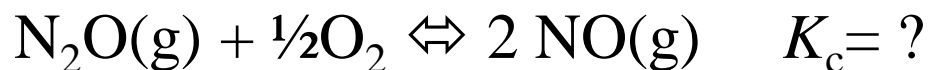
$$2x \rightarrow K^2$$

- A reakció egyenlet egy konstanssal történő osztása az egyensúlyi állandó megfelelő gyökét eredményezi.

$$\frac{1}{2}x \rightarrow \sqrt{K}$$



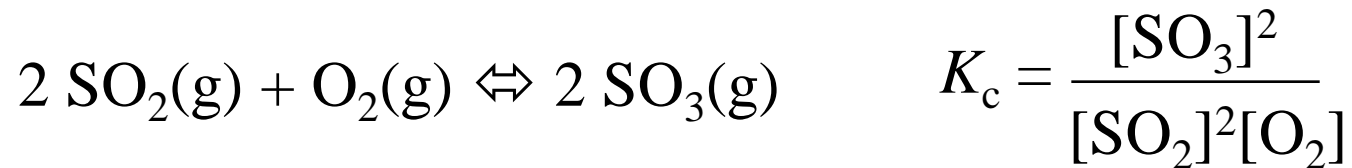
# Reakció egyenletek összeadása



$$K_c = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2\text{O}][\text{O}_2]^{1/2}} = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2][\text{O}_2]} \frac{[\text{N}_2][\text{O}_2]^{1/2}}{[\text{N}_2\text{O}]} = K_{c(3)} \frac{1}{K_{c(2)}} = 1.7 \cdot 10^{-13}$$

# Gáz egyensúlyi állandó, $K_p$

- Gázelegyek esetében:
- $K_p$ , a gáz komponensek parciális nyomásaiból számítható.

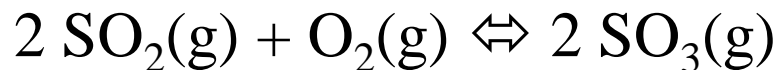


$$[\text{SO}_3] = \frac{n_{\text{SO}_3}}{V} = \frac{P_{\text{SO}_3}}{RT}$$

$$[\text{SO}_2] = \frac{n_{\text{SO}_2}}{V} = \frac{P_{\text{SO}_2}}{RT}$$

$$[\text{O}_2] = \frac{n_{\text{O}_2}}{V} = \frac{P_{\text{O}_2}}{RT}$$

# Egyensúlyi állandó, $K_p$



$$K_c = \frac{[\text{SO}_3]^2}{[\text{SO}_2]^2[\text{O}_2]} = \frac{\left(\frac{P_{\text{SO}_3}}{RT}\right)^2}{\left(\frac{P_{\text{SO}_2}}{RT}\right)^2 \frac{P_{\text{O}_2}}{RT}} = \frac{P_{\text{SO}_3}^2}{P_{\text{SO}_2}^2 P_{\text{O}_2}} RT$$

$$K_c = K_p(RT)$$

$$K_p = K_c(RT)^{-1}$$

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

# Tiszta folyadékok és szilárd anyagok

- Aktivitásuk egységnyi, ezért nem jelennek meg az a gázfázisra vonatkozó egyensúlyi állandóban



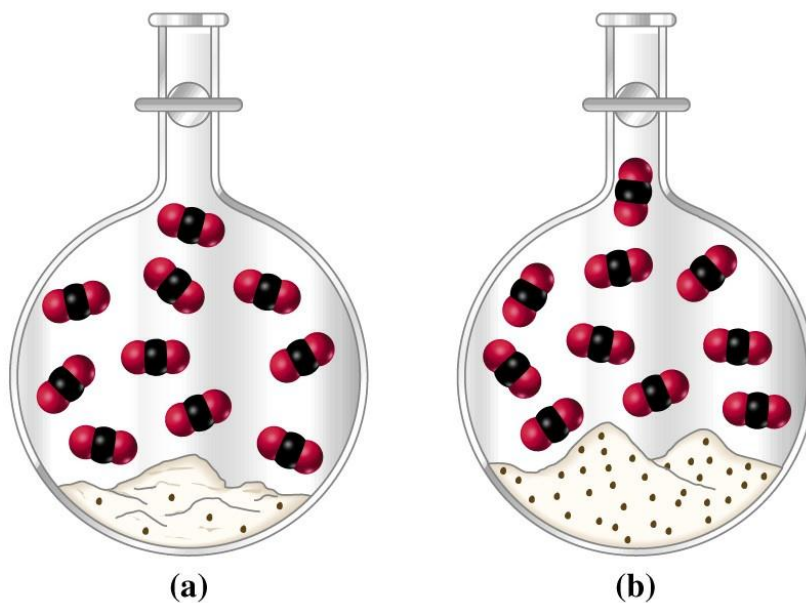
$$K_c = \frac{[\text{CO}][\text{H}_2]}{[\text{H}_2\text{O}]} = \frac{P_{\text{CO}}P_{\text{H}_2}}{P_{\text{H}_2\text{O}}} (RT)^{-1}$$

# Égetett mész



$$K_c = [\text{CO}_2]$$

$$K_p = P_{\text{CO}_2}(RT)$$

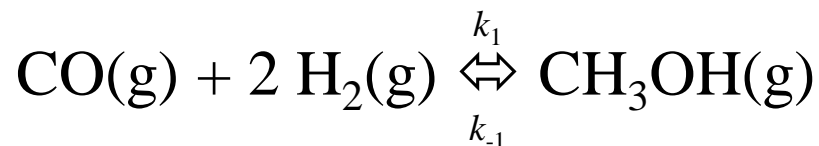


# 6'-4 Az egyensúlyi állandó számértékének jelentősége

TABLE 16.3 Equilibrium Constants of Some Common Reactions

Reaction	Equilibrium constant, $K_p$
$2 \text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{H}_2\text{O}(\text{l})$	$1.4 \times 10^{83}$ at 298 K
$\text{CaCO}_3(\text{s}) \rightleftharpoons \text{CaO}(\text{s}) + \text{CO}_2(\text{g})$	$1.9 \times 10^{-23}$ at 298 K
$2 \text{SO}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{SO}_3(\text{g})$	1.0 at about 1200 K
$\text{C}(\text{s}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \rightleftharpoons \text{CO}(\text{g}) + \text{H}_2(\text{g})$	3.4 at 1000 K
	$1.6 \times 10^{-21}$ at 298 K
	10.0 at about 1100 K

## 6'-5 A reakció hányados, $Q$ : a várható kémiai reakció irányának megjósolása.

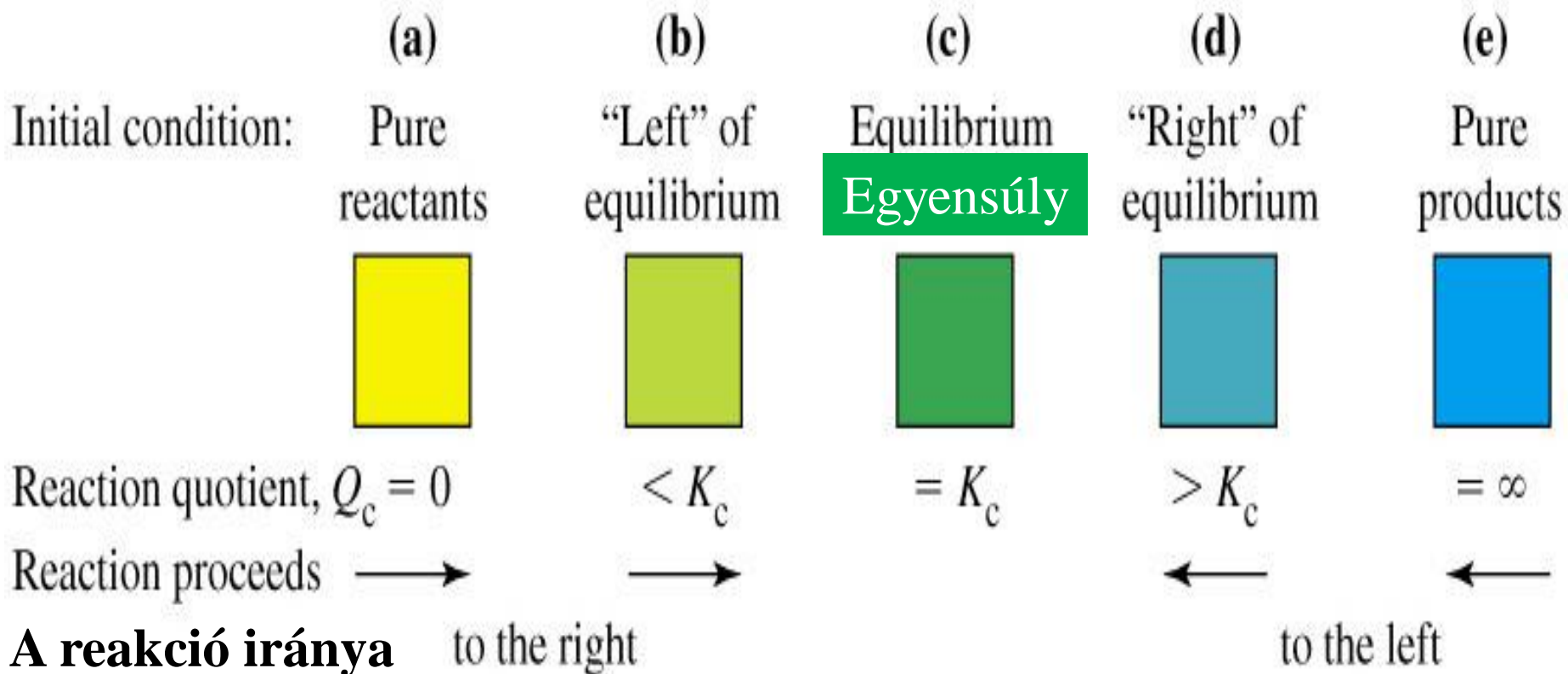


- A  $Q$  és az egyensúlyi állandó értékének összehasonlítása megadja az irányt.

$$Q_c = \frac{[\text{C}]_t^c [\text{D}]_t^d}{[\text{A}]_t^a [\text{B}]_t^b}$$

Egyensúlyban:  $Q_c = K_c$

# Reakció hányados és irány



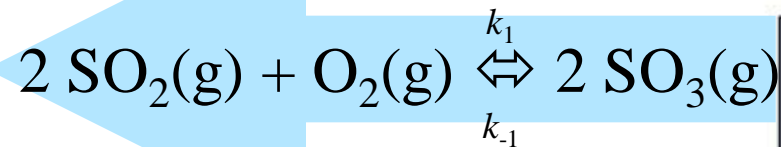
Ha a  $Q_c$  reakció hányados kisebb mint a  $K_c$  egyensúlyi állandó, akkor a reakció jobbra indul (a) és (b), ellenkező esetben balra indul (d), (e).



# 6'-6 Az egyensúly körülményeinek megváltozása: Le Châtelier elv

- Amikor egy egyensúlyban lévő rendszer hőmérsékletét, nyomását, vagy a reagensek aktivitását megváltoztatjuk, a rendszer úgy reagál hogy az új egyensúlyban csökkentse (amennyire lehet kompenzálja) a változást.
- Az egyensúlyban lévő rendszer a külső zavarásra úgy reagál, hogy a zavarás hatásait csökkentse.

# Le Châtelier elv: Példa

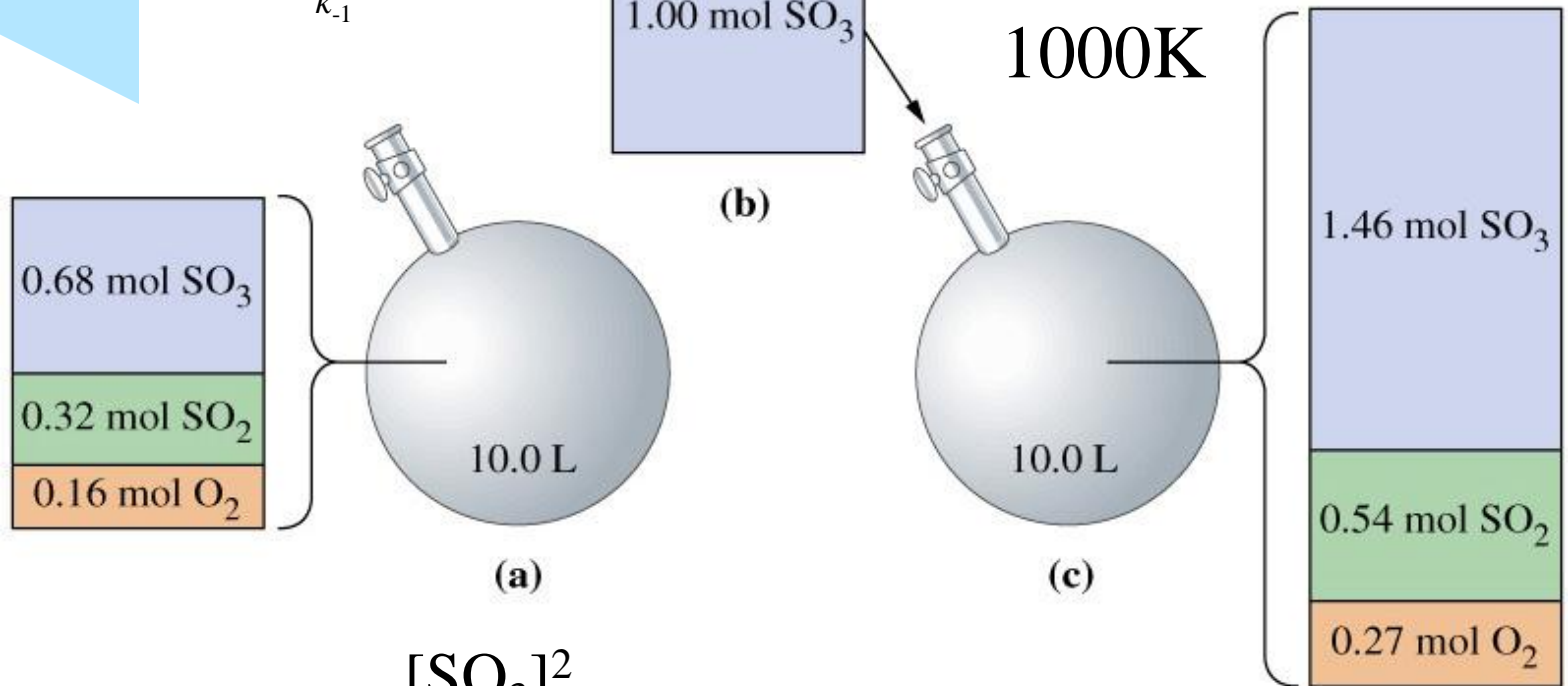


Add:

1.00 mol  $\text{SO}_3$

$$K_c = 282$$

1000K



$$Q = \frac{[\text{SO}_3]^2}{[\text{SO}_2]^2[\text{O}_2]} = K_c$$

$$Q > K_c$$

# A feltételek megváltozása

- Egy reakció komponens hozzáadása megváltoztatja a nyomást  $P_{\text{gas}}$ .
- Inert gáz hozzáadása megváltoztatja az össz. nyomást.
  - A relatív parciális nyomások változatlanok.
- A rendszer térfogatának megváltoztatása megváltoztatja az egyensúlyi mol számokat.

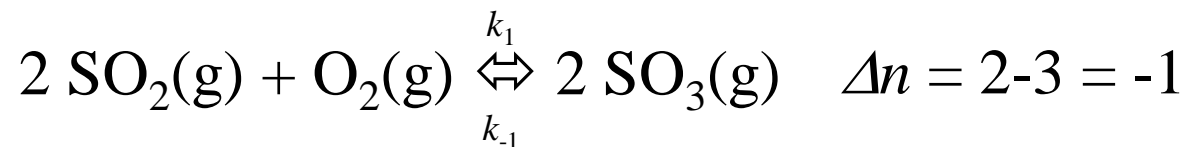
$$K_c = \frac{[\text{SO}_3]^2}{[\text{SO}_2]^2[\text{O}_2]} = \frac{\left(\frac{n_{\text{SO}_3}}{V}\right)^2}{\left(\frac{n_{\text{SO}_2}}{V}\right)^2 \frac{n_{\text{O}_2}}{V}} = \frac{n_{\text{SO}_3}^2}{n_{\text{SO}_2}^2 n_{\text{O}_2}} V$$

# A térfogatváltozás hatása

$$K_c = \frac{[G]^g[H]^h}{[A]^a[B]^b} = \frac{n_G^g n_H^h}{n_A^a n_B^b} V^{(a+b)-(g+h)}$$
$$= \frac{n_G^g n_H^h}{n_A^a n_B^b} V^{-\Delta n}$$

- Amikor a reakcióelegy térfogatát *csökkentjük* olyan változás következik be *ami a gáz molekulák számát csökkenti*. Ha a térfogatot *növeljük*, olyan változás következik be, amely növeli *a gáz molekulák számát*.

# A példánkon szemléltetve



$$K_c = \frac{n_{\text{SO}_3}^2}{n_{\text{SO}_2}^2 n_{\text{O}_2}} V$$

- Mivel molszám változás -1
- a térfogat növelése az előtte álló hányados csökkenését idézi elő:
- Számláló csökken, nevező nő
- A reakció balra indul.

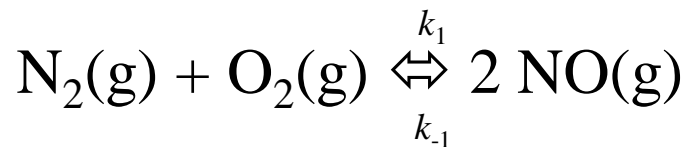
# A hőmérséklet hatása az egyensúlyra

- *Emeljük a hőmérsékletét* egy egyensúlyi elegynek akkor a reakció *endoterm* irányban indul.
- *Ha csökkentjük a hőmérsékletet* az *exoterm* reakciót indít.

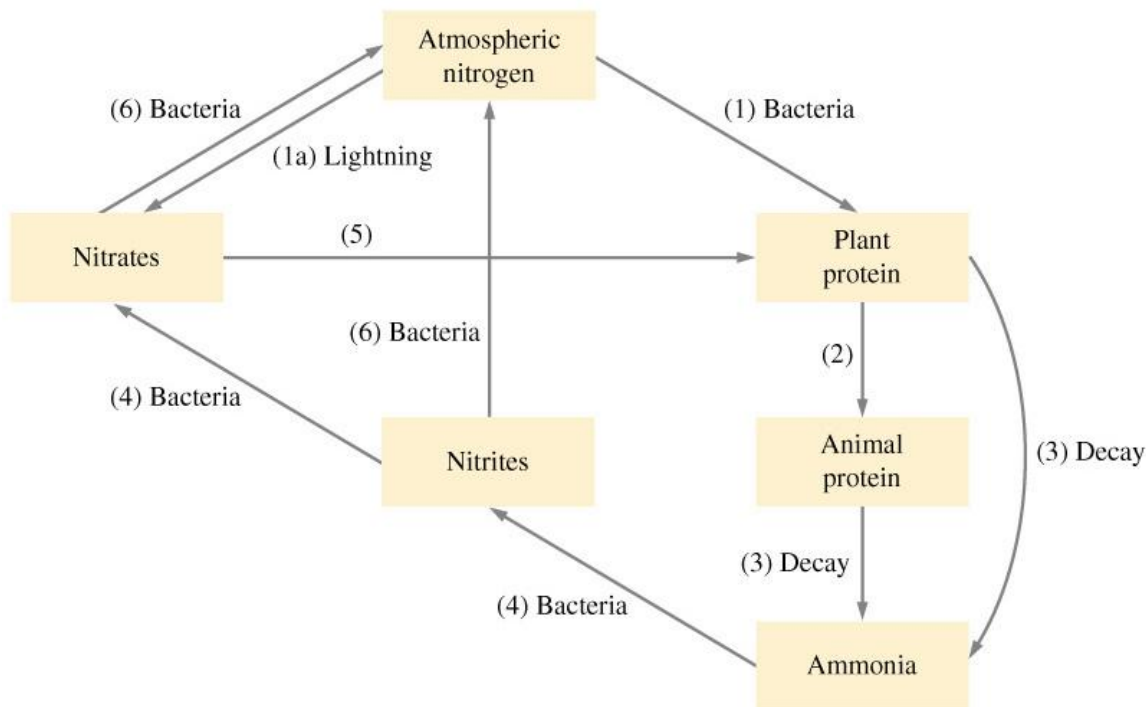
# A katalizátor hatása az egyensúlyra

- A katalizátor megváltoztatja a reakció mechanizmusát, csökkenti az aktiválási energia gátat.
- A katalizátor nem befolyásolja az egyensúlyt.
  - De befolyásolja az egyensúly beálltának *sebességét*.

# Fókusz: A nitrogén ciklus, nitrogén vegyületek szintézise



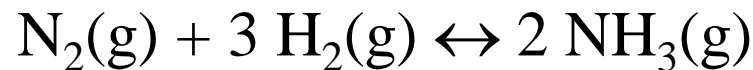
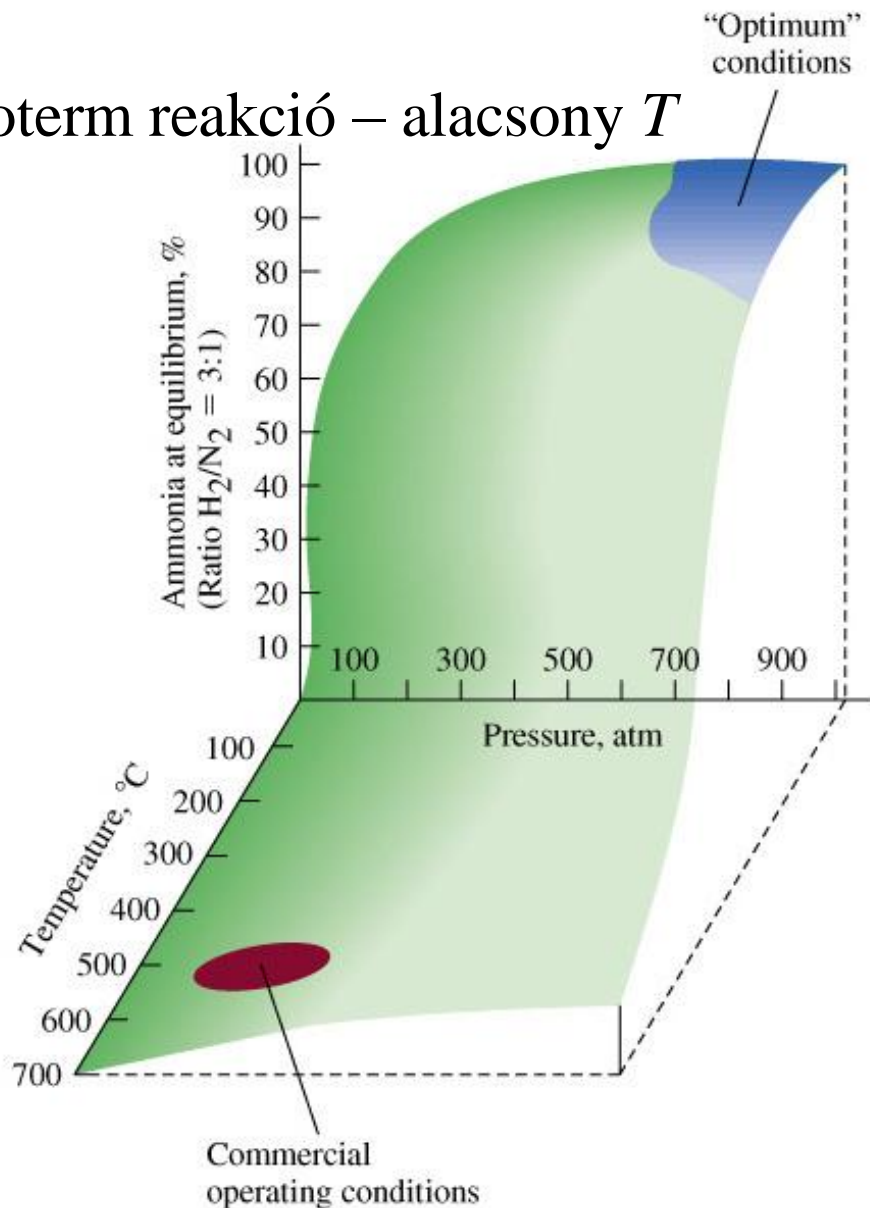
$$K_p = 4.7 \cdot 10^{-31} \text{ at } 298\text{K and } 1.3 \times 10^{-4} \text{ at } 1800\text{K}$$





# Ammónia szintézis

Exoterm reakció – alacsony  $T$



$$\Delta n = -2, \text{ nagy } P$$

Az optimális körülmények csak az egyensúlyra vonatkoznak, de nem mondanak semmit az egyensúly elérésének *sebességéről*.