

Reiknum með jafnvægisfastanum

Kaflí 15.4

Reiknum jafnvægisfastann

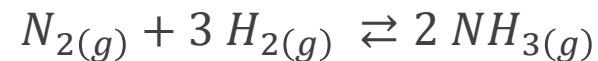
- ▶ Við vitum núna að jafnvægisfastinn K_c er fast hlutfall myndefna og hvarfefna við jafnvægi.

$$K_c = \frac{[myndefnin]}{[hvarfefnin]}$$

- ▶ Við vitum líka að jafnvægið er ekki háð magni efna né hvoru megin við efnajafnvægið við byrjum!
- ▶ Við vitum líka að stærð fastans segir til um hvor hliðin er virkari (hvort myndast meira af)
 - ▶ Hátt gildi á K þýðir að meira myndast af myndefnunum.
- ▶ Við vitum líka að jafnvægisfastinn er breytilegur með hitastigi.

Sýnidæmi 15.8

- ▶ Blanda vetnis og niturgass í lokuðu kerfi er leyft að ná jafnvægi við 472°C. Blanda gastegundanna við jafnvægi var mæld og kom í ljós að hlutþrýstingur vetnissgassins var 7,38 atm, niturgassins 2,46 atm og hlutþrýstingur ammoníunnar 0,166 atm.
- ▶ Hvert er gildi K_p við 472°C fyrir hvarfið :



Sýnidæmi 15.8 - lausn

- ▶ Okkur er gefin gildin á hlutþrýstingi gasanna við jafnvægi. Svo að við skoðum bara jafnvægislíkinguna og setjum inn gildin við jafnvægi !

- ▶ Jafnvægislíkingin :

$$K_p = \frac{\text{myndefni}}{\text{hvarfefni}} = \frac{(P_{NH_3})^2}{P_{N_2} * (P_{H_2})^3}$$

- ▶ Setjum inn gildin :

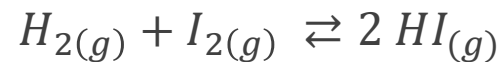
- ▶
$$K_p = \frac{(P_{NH_3})^2}{P_{N_2} * (P_{H_2})^3} = \frac{(0,166 \text{ atm})^2}{(2,46 \text{ atm}) * (7,38 \text{ atm})^3} = 2,79 * 10^{-5}$$

Getum ekki alltaf reiknað K_c beint

- ▶ Við þekkjum t.d ekki alltaf mólstyrki allra efnasambandanna við jafnvægi
 - ▶ En það skiptir ekki máli ef við vitum hvernig jafnvægið liggur!
- ▶ Skoðum nokkur skref sem við förum í gegnum þegar við þekkjum ekki alla styrkina :
 - ▶ 1. Setjum upp töflu þar sem við setjum upphafs- og jafnvægisstyrkina.
 - ▶ 2. Ef við þekkjum bæði upphafs og jafnvægisstyrkina þá reiknum við breytinguna
 - ▶ 3. Notum hlutfallin í jöfnunni til að reikna breytinguna fyrir öll efnin.
 - ▶ 4. Reiknum styrkina við jafnvægi
 - ▶ 5. Reiknum jafnvægisfastann K
 - ▶ Skoðum tvö svona dæmi !

Sýnidæmi 15.9

- ▶ Lokað kerfi inniheldur $1,000 \cdot 10^{-3} \text{ M H}_2$ og $2,000 \cdot 10^{-3} \text{ I}_2$ við 448°C og er leyft að ná jafnvægi. Greining sýnir að við jafnvægi er styrkur HI $1,87 \cdot 10^{-3} \text{ M}$.
- ▶ Reiknaðu Kc við 448°C fyrir hvarfið :



Sýnidæmi 15.9 - lausn 1/3

- Setjum upp töflu þar sem við skráum gildin sem við vitum !

	$\text{H}_2 +$	$\text{I}_2 \rightleftharpoons$	2HI
i	$1,000 * 10^{-3} \text{ M}$	$2,000 * 10^{-3} \text{ M}$	0 M
Δ	- x	- x	+ 2x
j			$1,87 * 10^{-3} \text{ M}$

- Skráum síðan breytingarnar sem verða milli hvarf og myndefnanna inn í töfluna.
 - Rauðu gildin í töflunni !
 - Þau eru + eða - eftir því hvort þarf til að jafnvægi náist á og stuðlarnir eru sömu stuðlar og eru í efnajöfnunni !

Sýnidæmi 15.9 - lausn 2/3

- ▶ Gildin við jafnvægi er upphafsgildin mínus breytingin.
 - ▶ Notum það sem við vitum til að átta okkur á hvað gildið á x er !
- ▶ Hérna getum við t.d reiknað x með :

$$0 + 2x = 1,87 * 10^{-3} \Rightarrow x = \frac{1,87 * 10^{-3}}{2} = 0,935 * 10^{-3}$$

- ▶ Þá getum við líka reiknað styrkiná á I_2 og H_2 :

$$[H_2]_j = 1,000 * 10^{-3} - 0,935 * 10^{-3} = 0,065 * 10^{-3} M$$

$$[I_2]_j = 2,000 * 10^{-3} - 0,935 * 10^{-3} = 1,065 * 10^{-3} M$$

Sýnidæmi 15.9 - lausn 3/3

- ▶ Þar sem við erum komin með alla jafnvægisstyrkina þá er það eina í stöðunni að setja upp jafnvægislíkinguna og reikna jafnvægisfastann

- ▶ Jafnvægislíkingin :

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H_2] * [I_2]}$$

- ▶ Setjum inn gildin :

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H_2] * [I_2]} = \frac{(1,87 * 10^{-3})^2}{(0,065 * 10^{-3}) * (1,065 * 10^{-3})} = 51$$

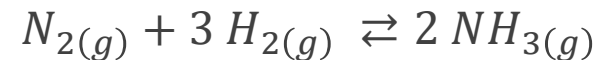
Gagnsemi jafnvægisfastans

- ▶ Við erum búin að sjá að K er hlutfall myndefna og hvarfefna við jafnvægi.
- ▶ Við erum einnig búin að sjá að við getum metið hvernig jafnvægið liggur eftir stærðinni á K .
- ▶ En hvað þegar við erum með of mikið af hvarfefnum eða myndefnum, eða of lítið ?
 - ▶ Við vitum að jafnvægið er óháð magni og mun með tímanum jafna sig.
- ▶ En núna ætlum við að skoða hvarfkvótann Q sem eru útreikningar á því hvernig jafnvægið næst á!
- ▶ Formleg skilgreining : *Q er tala sem fæst með því að setja mólstyrki eða hlutþrýstings gildi inn í jafnvægislíkinguna á hvaða tímapunkti hvarfsins sem er.*

Hvarfkvótinn Q

- Skoðum Haber hvarfið við 472 °C

- Haber hvarfið :



- Jafnvægislíkingin og fastinn við 472 °C er :

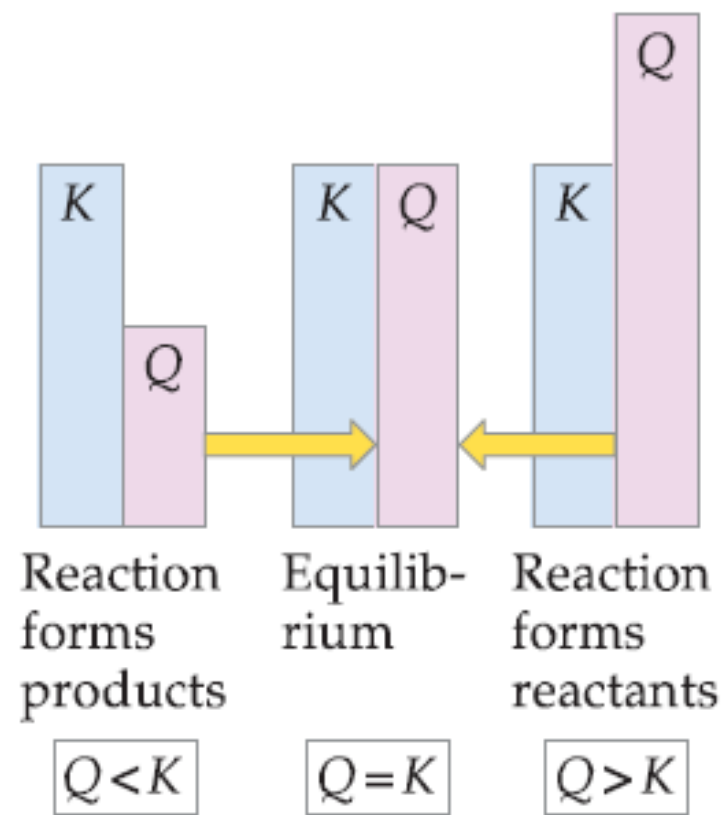
$$K_c = \frac{[NH_3]^2}{[N_2] * [H_2]^3} = 0,105 \text{ við } 472 \text{ } ^\circ C$$

- Við erum með 2 mól af NH_3 og H_2 og 1 mól af N_2 í 1,0 L kerfi og við viljum vita hvernig það mun ná jafnvægi, svo við skellum því beint í jafnvægislíkinguna :

$$Q = \frac{[NH_3]^2}{[N_2] * [H_2]^3} = \frac{2^2}{1 * 2^3} = 0,500$$

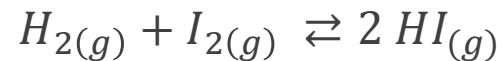
Áframhald á hvarfkvótanum Q

- ▶ Það að við fáum $Q = 0,5$ í staðinn fyrir viðurkennda gildið við jafnvægi $K = 0,105$ þýðir að við erum með of mikið af myndefni!
- ▶ Myndefnin eru fyrir ofan strik og of mikið magn mun því hækka töluna sem kemur út úr jafnvægislíkingunni.
- ▶ Setjum þetta upp svo það sé auðveldara að muna það :
- ▶ Ef $Q > K$ þá er of mikið að myndefnum og hvarfið mun leita til hvarfefnanna til að leiðrétta það.
- ▶ Ef $Q < K$ þá er of lítið af myndefnum og hvarfið mun leita til myndefnanna til að leiðrétta það .
- ▶ Ef $Q = K$ þá er hvarfið nú þegar við jafnvægi.



Sýnidæmi 15.10

- ▶ Við 448 °C er jafnvægisfastinn $K_c = 50,5$ fyrir hvarfið :



- ▶ Segðu til í hvaða átt hvarfið mun leita í átt að jafnvægi ef við byrjum með $2,0 \cdot 10^{-2}$ mól af HI, $1,0 \cdot 10^{-2}$ mól af H_2 og $3,0 \cdot 10^{-2}$ mól af I_2 í 2,00 L ílát.

Sýnidæmi 15.10 - lausn

- Byrjum á að reikna mólstyrkina
- $[HI] = \frac{2,0 * 10^{-2} \text{ mól}}{2,00 \text{ L}} = 1,0 * 10^{-2} M$
- $[H_2] = \frac{1,0 * 10^{-2} \text{ mól}}{2,00 \text{ L}} = 5,0 * 10^{-3} M$
- $[I_2] = \frac{3,0 * 10^{-2} \text{ mól}}{2,00 \text{ L}} = 1,5 * 10^{-2} M$
- Setjum það síðan inn í jafnvægislíkinguna og reiknum Q :

$$Q = \frac{[HI]^2}{[H_2] * [I_2]} = \frac{(1,0 * 10^{-2})^2}{(5,0 * 10^{-3}) * (1,5 * 10^{-2})} = 1,3$$

- Sem er minna en K og því hlýtur efnahvarfið að leita til hægri í átt að myndefnunum !

Sýnidæmi 15.11

- ▶ 1,000 L flaska er fyllt með 1,000 mól af H_2 gasi og 2,000 mólum af I_2 við 448°C



- ▶ Hver er mólstyrkur allra efnasambandanna við jafnvægi?

Sýnidæmi 15.11 - Lausn 1/3

► Setjum upp töflu:

	H ₂	+ I ₂	⇌ 2 HI
i	1,000	2,000	0
Δ	-x	-x	+2x
J	1,000 - x	2,000 - x	2x

► Þá er :

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H_2] * [I_2]} = \frac{(2x)^2}{(1,000 - x) * (2,000 - x)} = 50,5$$

Sýnidæmi 15.11 - Lausn 2/3

- Einangrum x

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H_2] * [I_2]} = \frac{(2x)^2}{(1,000 - x) * (2,000 - x)} = 50,5$$

$$4x^2 = 50,5 * (1,000 - x) * (2,000 - x) \Rightarrow 4x^2 = 50,5 * (x^2 - 3,000x + 2,000)$$

$$46,5x^2 - 151,5x + 101,0 = 0$$

- Sem er annars stigs margliða og hægt að leysa með BATMAN

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Sýnidæmi 15.11 - Lausn 3/3

- ▶ BATMAN gefur okkur :

$$x = \frac{-(-151,5) \pm \sqrt{(-151,5)^2 - 4 * 46,5 * 101}}{2 * 46,5} = 2,323 \text{ eða } 0,935$$

- ▶ Rótin $x = 2,323$ gengur ekki upp því að mólstyrkur hvarfefnanna okkar við jafnvægi yrði neikvæður!
- ▶ Því er $x = 0,935$
- ▶ Styrkirir við jafnvægi eru því:

$$[H_2] = 1,000 - 0,935 = 0,065 \text{ M} \quad \text{og} \quad [I_2] = 2,000 - 0,935 = 1,065 \text{ M}$$

$$[HI] = 2 * 0,935 = 1,87 \text{ M}$$