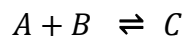




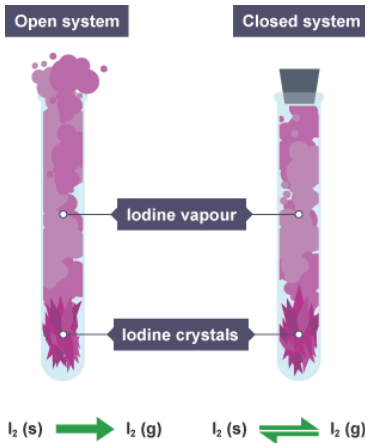
1

1. Terminologie 2

1.1 Reversibiliteit van een reactie



In een gesloten systeem, kan iedere reactie beschouwd worden als een evenwicht.



Waarbij het evenwicht in extreme gevallen helemaal links of rechts ligt

Door variatie in reactie-omstandigheden kan het evenwicht of de evenwichtsligging bepaald worden

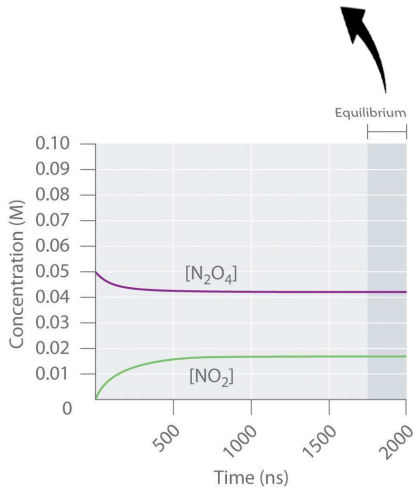


Zie punt 3

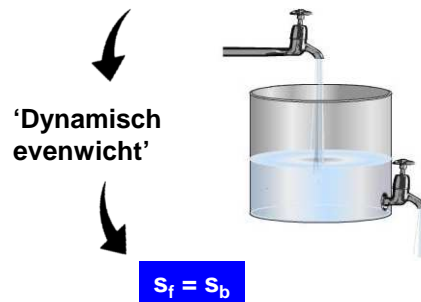
1. Terminologie 3

1.2 Evenwichtstoestand

Macroscopisch geen verandering meer



Microscopisch zal er nog altijd reactie van links naar rechts doorgaan, maar tegelijkertijd zal er evenveel van rechts naar links doorgaan



1. Terminologie 4

1.2 Evenwichtstoestand

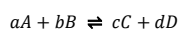


Wanneer $s_f = s_b$ wordt het evenwicht bereikt

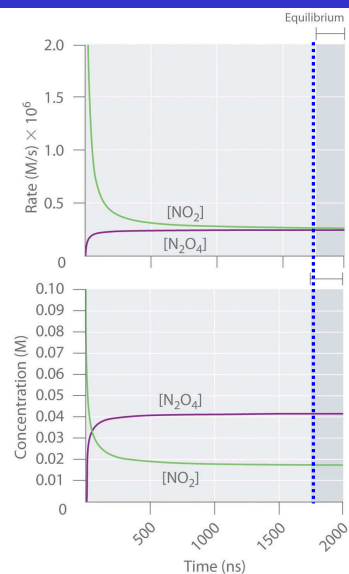
$$k_f \cdot [N_2O_4]_{ev} = k_r \cdot [NO_2]_{ev}^2$$

$$K_c = \frac{k_f}{k_r} = \frac{[NO_2]_{ev}^2}{[N_2O_4]_{ev}}$$

Algemeen:



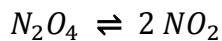
$$K_c = \frac{[C]_{ev}^c [D]_{ev}^d}{[A]_{ev}^a [B]_{ev}^b}$$



1. Terminologie

5

1.2 Evenwichtstoestand

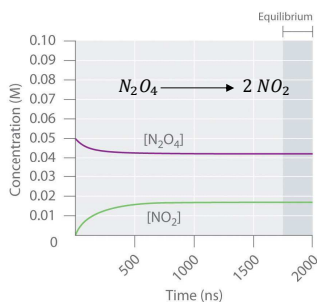


a) 0,05M N_2O_4 bij 25°C in gesloten vat

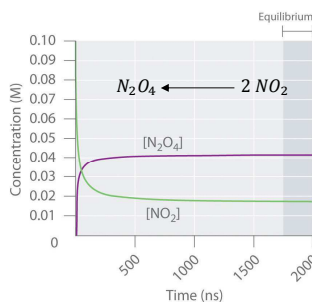
→ Evenwicht: 0,0421M N_2O_4 en 0,0158M NO_2

b) 0,10M NO_2 bij 25°C in gesloten vat

→ Evenwicht: 0,0421M N_2O_4 en 0,0158M NO_2



(a)



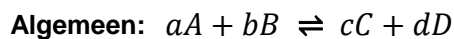
(b)

Evenwicht wordt bereikt, via elke reactierichting

1. Terminologie

6

1.3 De evenwichtsconstante K_c



$$K_c = \frac{[C]_{ev}^c [D]_{ev}^d}{[A]_{ev}^a [B]_{ev}^b}$$

Reactie	Temperatuur (K)	Evenwichtsconstante (K_c)
$S(s) + O_2(g) \rightleftharpoons SO_2(g)$	300	4.4×10^{53}
$2H_2(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2H_2O(g)$	500	2.4×10^{47}
$H_2(g) + Cl_2(g) \rightleftharpoons 2HCl(g)$	300	1.6×10^{33}
$H_2(g) + Br_2(g) \rightleftharpoons 2HBr(g)$	300	4.1×10^{18}
$2NO(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2NO_2(g)$	300	4.2×10^{13}
$3H_2(g) + N_2(g) \rightleftharpoons 2NH_3(g)$	300	2.7×10^8
$H_2(g) + D_2(g) \rightleftharpoons 2HD(g)$	100	1.92
$H_2(g) + I_2(g) \rightleftharpoons 2HI(g)$	300	2.9×10^{-1}
$I_2(g) \rightleftharpoons 2I(g)$	800	4.6×10^{-7}
$Br_2(g) \rightleftharpoons 2Br(g)$	1000	4.0×10^{-7}
$Cl_2(g) \rightleftharpoons 2Cl(g)$	1000	1.8×10^{-9}
$F_2(g) \rightleftharpoons 2F(g)$	500	7.4×10^{-13}

K_c is T-afhankelijk

Aangezien s_f en s_b T-afhankelijk zijn

1. Terminologie

7

1.4 De evenwichtsconstante K_p

Algemeen: $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$



$$K_c = \frac{[C]_{ev}^c [D]_{ev}^d}{[A]_{ev}^a [B]_{ev}^b}$$

GASSEN:



$$K_p = \frac{P_{C_{ev}}^c \cdot P_{D_{ev}}^d}{P_{A_{ev}}^a \cdot P_{B_{ev}}^b}$$

Aangezien:

$$P_{A_{ev}} \cdot V = n_{A_{ev}} \cdot R \cdot T \quad P_{B_{ev}} \cdot V = n_{B_{ev}} \cdot R \cdot T \quad P_{C_{ev}} \cdot V = n_{C_{ev}} \cdot R \cdot T \quad P_{D_{ev}} \cdot V = n_{D_{ev}} \cdot R \cdot T$$

$$P_{A_{ev}} = [A]_{ev} \cdot R \cdot T \quad P_{B_{ev}} = [B]_{ev} \cdot R \cdot T \quad P_{C_{ev}} = [C]_{ev} \cdot R \cdot T \quad P_{D_{ev}} = [D]_{ev} \cdot R \cdot T$$

$$K_p = \frac{P_{C_{ev}}^c \cdot P_{D_{ev}}^d}{P_{A_{ev}}^a \cdot P_{B_{ev}}^b} = \frac{[C]_{ev}^c [D]_{ev}^d}{[A]_{ev}^a [B]_{ev}^b} (R \cdot T)^{(c+d)-(a+b)}$$

$$K_p = K_c \cdot (R \cdot T)^{\Delta n}$$

$\Delta n = (c+d)-(a+b)$ = de toename in aantal mol gas

1. Terminologie

8

1.4 De evenwichtsconstante K_p

Voorbeeld:

Voor de reactie $2 \text{SO}_{3(g)} \rightleftharpoons 2 \text{SO}_{2(g)} + \text{O}_{2(g)}$ bij 1100 K is $K_c = 0,0272 \text{ mol/L}$. Bereken K_p .

$$K_p = K_c \cdot (R \cdot T)^{\Delta n} = 0,0272 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot (0,082 \text{ L} \cdot \text{atm} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 1100 \text{ K})^{3-2} = 2,45 \text{ atm}$$

Voorbeeld: Bepaal Δn voor onderstaande reacties;

- $2 \text{SO}_{3(g)} \rightleftharpoons 2 \text{SO}_{2(g)} + \text{O}_{2(g)}$ $\Delta n = +1$ (voorbeeld hierboven)
- $\text{CO}_{(g)} + \text{Cl}_{2(g)} \rightleftharpoons \text{COCl}_{2(g)}$ $\Delta n = -1$
- $\text{N}_{2(g)} + 3 \text{H}_{2(g)} \rightleftharpoons 2 \text{NH}_{3(g)}$ $\Delta n = -2$
- $\text{N}_{2(g)} + \text{O}_{2(g)} \rightleftharpoons 2 \text{NO}_{(g)}$ is $\Delta n = 0$

Opm: wanneer $\Delta n = 0$ (er zijn evenveel gasmoleculen rechts van de reactievergelijking als er zijn links van de reactievergelijking), dan is $K_p = K_c$ want $(R \cdot T)^0 = 1$.

$$K_p = K_c \cdot (R \cdot T)^{\Delta n}$$

1. Terminologie 9

1.5 Heterogene evenwichten

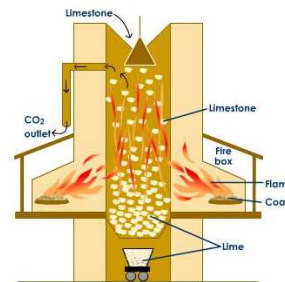
Wat zijn heterogene evenwichten ?

Meerdere fasen betrokken bij het evenwicht

waarbij MINSTENS één component in de GASFASE



CEMENT



1. Terminologie 10

1.5 Heterogene evenwichten



$$"K_c" = \frac{[\text{CaO}]_{sev} \cdot [\text{CO}_2]_{gev}}{[\text{CaCO}_3]_{sev}}$$

[vaste stof] is constant aangezien het volume verdubbelt bij verdubbeling van de hoeveelheid



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

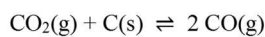
1. Terminologie

11

1.5 Heterogene evenwichten

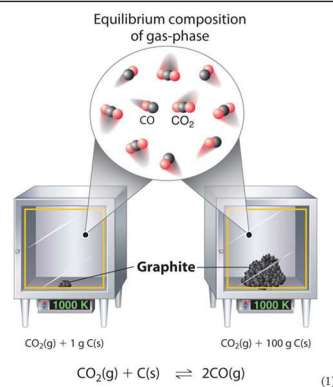
Voorbeeld:

De evenwichtsconstante voor de reactie:



bij 1000K is identiek, of men nu 1 gram koolstof of 100 g koolstof in het gesloten systeem brengt. In beide gevallen zal de samenstelling van de gasfase bij evenwicht identiek zijn.

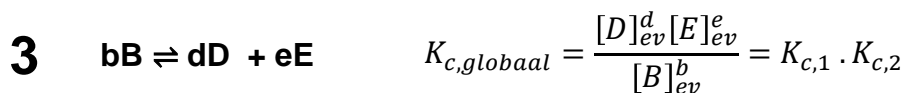
$$K_c = \frac{[\text{CO}]_{g_{ev}}^2}{[\text{CO}_2]_{g_{ev}}}$$



1. Terminologie

12

1.6 De evenwichtsconstante van een globale reactie



$\mathbf{3} = \mathbf{1} \cdot \text{reactie1} + \mathbf{1} \cdot \text{reactie2}$

$$\mathbf{K}_{c,3} = \mathbf{K}_{c,1} \cdot \mathbf{K}_{c,2}$$

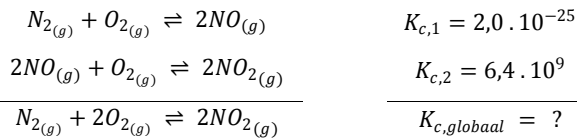
$$\log K_{c,global} = \mathbf{1} \cdot \log K_{c,1} + \mathbf{1} \cdot \log K_{c,2}$$

1. Terminologie

13

1.6 De evenwichtsconstante van een globale reactie

Voorbeeld: Bepaal de globale evenwichtsconstante op basis van onderstaande gegevens:



Aangezien reactie 3 = reactie 1 + reactie 2 is

$\log K_{c,global} = \log K_{c,1} + \log K_{c,2}$ en is

$$K_{c,global} = K_{c,1} \cdot K_{c,2} = 2,0 \cdot 10^{-25} \cdot 6,4 \cdot 10^9 = 1,3 \cdot 10^{-15}$$

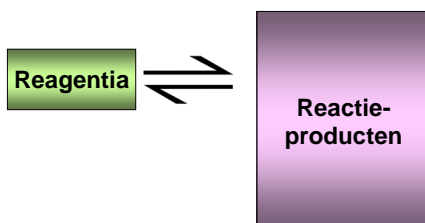
2. Gebruik van de evenwichtsconstante K

14

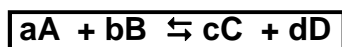
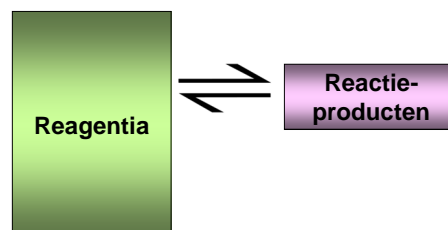
2.1 Oordeel over de 'extent' van een reactie

INTERPRETATIE VAN DE NUMERIEKE WAARDE VAN K

K zeer GROOT:



K zeer KLEIN:



$$K_c = \frac{[C]_{ev}^c [D]_{ev}^d}{[A]_{ev}^a [B]_{ev}^b}$$

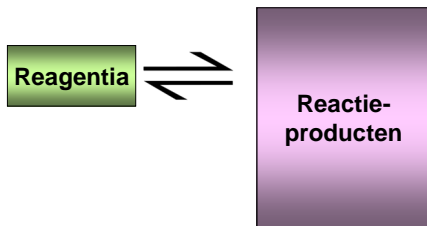
2. Gebruik van de evenwichtsconstante K

15

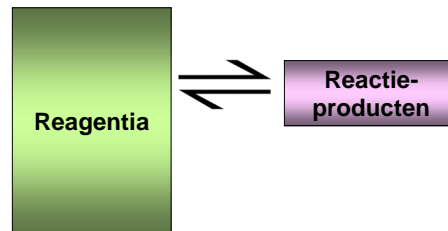
2.1 Oordeel over de 'extent' van een reactie

INTERPRETATIE VAN DE NUMERIEKE WAARDE VAN K

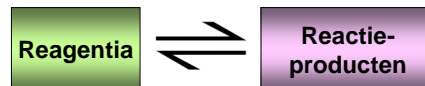
K zeer GROOT:



K zeer KLEIN:



K noch zeer groot, noch zeer klein (0,001-1000):

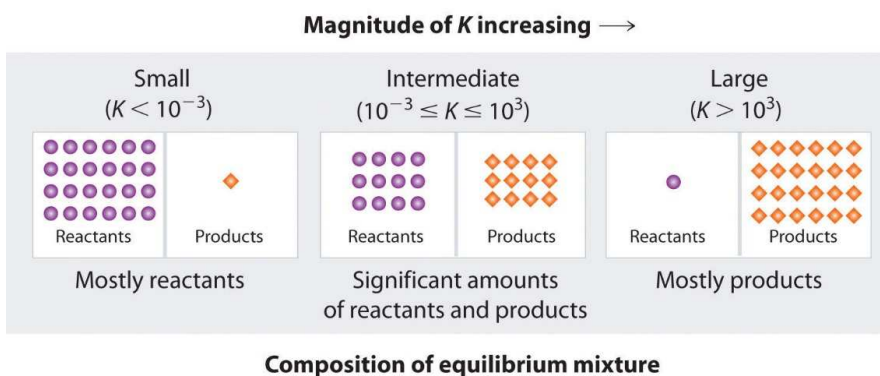


2. Gebruik van de evenwichtsconstante K

16

2.1 Oordeel over de 'extent' van een reactie

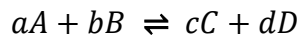
INTERPRETATIE VAN DE NUMERIEKE WAARDE VAN K



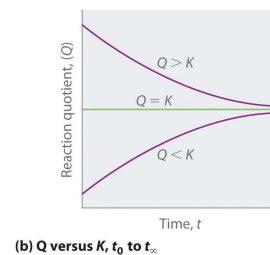
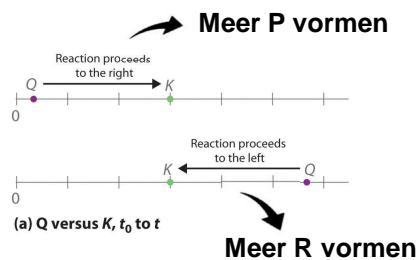
2. Gebruik van de evenwichtsconstante K

17

2.2 Voorspellen van de richting van een reactie



Evenwichtstoestand	Actuele toestand (evenwicht of niet)
$K_c = \frac{[C]_{ev}^c [D]_{ev}^d}{[A]_{ev}^a [B]_{ev}^b}$	$Q_{c,actueel} = \frac{[C]_{actueel}^c [D]_{actueel}^d}{[A]_{actueel}^a [B]_{actueel}^b}$



2. Gebruik van de evenwichtsconstante K

18

2.3 Berekenen evenwichtsconcentraties via K

Stap 1. Balanceer de reactievergelijking

Stap 2. Maak onderstaande tabel op voor de reactievergelijking

	Reagentia	\rightleftharpoons	Producten
Initiële concentratie			
Verandering			
Evenwichtsconcentratie			

Definieer x als de concentratie (M) van één van de componenten die weg reageert of vormt tot evenwicht wordt bereikt. Maak gebruik van de stoichiometrie om de concentratie van de andere componenten tot evenwicht uit te schrijven in functie van x

Stap 3. Schrijf de evenwichtsconstante uit in functie van de evenwichtsconcentraties uit stap 2. Los de tweedegraadsvergelijking op en kies die wiskundige oplossing die chemisch relevant is.

2. Gebruik van de evenwichtsconstante K

19

2.3 Berekenen evenwichtsconcentraties via K

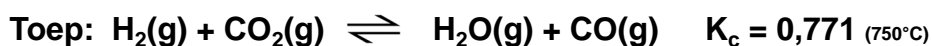
Stap 4. Bereken de nieuwe evenwichtsconcentraties uit x

Stap 5. Verifieer jouw resultaat door substitutie van de evenwichtsconcentraties in de vergelijking van de evenwichtsconstante

2. Gebruik van de evenwichtsconstante K

20

2.3 Berekenen evenwichtsconcentraties via K



In een reactievat van 500ml wordt 0.005 mol H_2 , 0.010 mol CO_2 , 0.020 mol CO en 0.015 mol H_2O samengebracht. In welke richting zal de reactie verlopen en wat is de concentratie van elke component bij evenwicht?

Oplossing deel 1 – voorspellen van de reactierichting

$$Q_{c,\text{actueel}} = \frac{[\text{H}_2\text{O}]_{\text{actueel}}[\text{CO}]_{\text{actueel}}}{[\text{H}_2]_{\text{actueel}}[\text{CO}_2]_{\text{actueel}}} = 6 \quad K_c = 0,771$$

$$[\text{H}_2] = \frac{0,005 \text{ mol}}{0,500 \text{ L}} = 0,010\text{M}$$

$$[\text{H}_2\text{O}] = \frac{0,015 \text{ mol}}{0,500 \text{ L}} = 0,030\text{M}$$

$$[\text{CO}_2] = \frac{0,010 \text{ mol}}{0,500 \text{ L}} = 0,020\text{M}$$

$$[\text{CO}] = \frac{0,020 \text{ mol}}{0,500 \text{ L}} = 0,040\text{M}$$

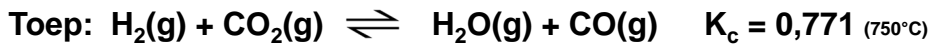
$$Q_{c,\text{actueel}} > K_c$$

Naar links

$[\text{H}_2\text{O}]$ en $[\text{CO}]$ moet zakken
 $[\text{H}_2]$ en $[\text{CO}_2]$ moet stijgen

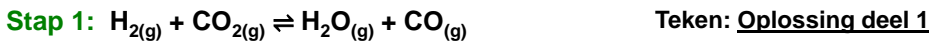
2. Gebruik van de evenwichtsconstante K 21

2.3 Berekenen evenwichtsconcentraties via K



In een reactievat van 500ml wordt 0.005 mol H_2 , 0.010 mol CO_2 , 0.020 mol CO en 0.015 mol H_2O samengebracht. In welke richting zal de reactie verlopen en wat is de concentratie van elke component bij evenwicht?

Oplossing deel 2 – berekenen van evenwichtsconcentraties



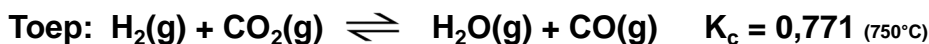
Stap 2:

	$\text{H}_{2(\text{g})}$	+	$\text{CO}_{2(\text{g})}$	\rightleftharpoons	$\text{H}_2\text{O}_{(\text{g})}$	+	$\text{CO}_{(\text{g})}$
Initiële concentratie	0,010		0,020		0,030		0,040
Verandering	+x		+x		-x		-x
Evenwichtsconcentratie	0,010+x		0,020+x		0,030-x		0,040-x

Stap 3: $K_c = \frac{[\text{H}_2\text{O}]_{ev}[\text{CO}]_{ev}}{[\text{H}_2]_{ev}[\text{CO}_2]_{ev}} = \frac{[0,030 - x][0,040 - x]}{[0,010 + x][0,020 + x]}$

2. Gebruik van de evenwichtsconstante K 22

2.3 Berekenen evenwichtsconcentraties via K



In een reactievat van 500ml wordt 0.005 mol H_2 , 0.010 mol CO_2 , 0.020 mol CO en 0.015 mol H_2O samengebracht. In welke richting zal de reactie verlopen en wat is de concentratie van elke component bij evenwicht?

Oplossing deel 2 – berekenen van evenwichtsconcentraties

Stap 3: $K_c = \frac{[\text{H}_2\text{O}]_{ev}[\text{CO}]_{ev}}{[\text{H}_2]_{ev}[\text{CO}_2]_{ev}} = \frac{[0,030 - x][0,040 - x]}{[0,010 + x][0,020 + x]}$

$$x_2 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$ax^2 + bx + c = 0$$

Wiskundig

↓

2 wortels correct

Chemisch

↓

één wortel niet mogelijk

oplossen 2^{de} graadsvgl.

~~$x_1 = 0,3951 \text{ M}$~~

$x_2 = 0,001156 \text{ M}$

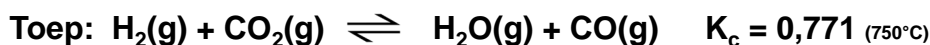
Negatief getal

Getal → - [conc]

2. Gebruik van de evenwichtsconstante K

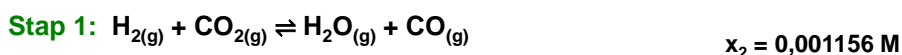
23

2.3 Berekenen evenwichtsconcentraties via K



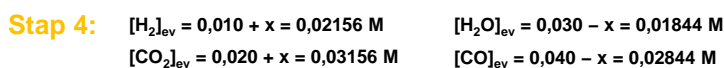
In een reactievat van 500ml wordt 0.005 mol H_2 , 0.010 mol CO_2 , 0.020 mol CO en 0.015 mol H_2O samengebracht. In welke richting zal de reactie verlopen en wat is de concentratie van elke component bij evenwicht?

Oplossing deel 2 – berekenen van evenwichtsconcentraties



Stap 2:

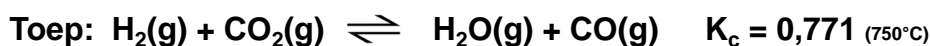
	$\text{H}_2(\text{g})$	+	$\text{CO}_2(\text{g})$	\rightleftharpoons	$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	+	$\text{CO}(\text{g})$
Initiële concentratie	0,010		0,020		0,030		0,040
Verandering	+x		+x		-x		-x
Evenwichtsconcentratie	0,010+x		0,020+x		0,030-x		0,040-x



2. Gebruik van de evenwichtsconstante K

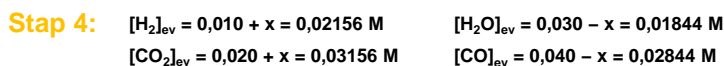
24

2.3 Berekenen evenwichtsconcentraties via K



In een reactievat van 500ml wordt 0.005 mol H_2 , 0.010 mol CO_2 , 0.020 mol CO en 0.015 mol H_2O samengebracht. In welke richting zal de reactie verlopen en wat is de concentratie van elke component bij evenwicht?

Oplossing deel 2 – berekenen van evenwichtsconcentraties



Stap 5: Verificatie K_c

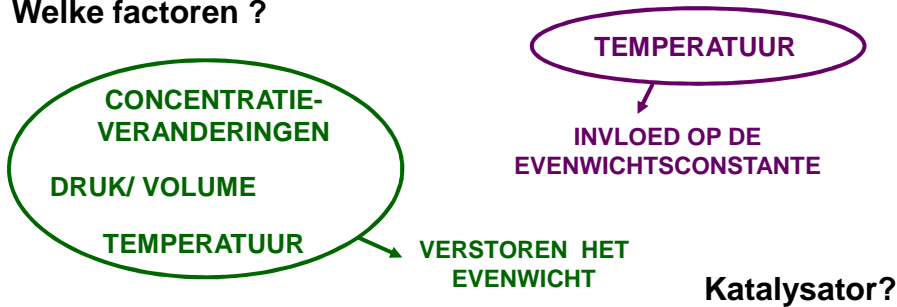
$$K_c = \frac{[\text{H}_2\text{O}]_{\text{ev}}[\text{CO}]_{\text{ev}}}{[\text{H}_2]_{\text{ev}}[\text{CO}_2]_{\text{ev}}} = \frac{[0,01844][0,02844]}{[0,02156][0,03156]} = 0,771 \quad \rightarrow \text{KLOPT !!!}$$

3. Veranderingen in reactiecondities

25

PRINCIPE VAN LE CHATELIER: een systeem in evenwicht waarop een **EXTERNE** invloed wordt uitgeoefende reageert zo dat het deze invloed zal tegenwerken waardoor aldus een nieuw evenwicht wordt bereikt

Welke factoren ?

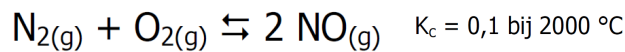


3. Veranderingen in reactiecondities

26

3.1 Verandering in concentratie

Evenwichtsc^e blijft gelijk, enkel nieuwe evenwichtsconcentraties
samenstelling



Begin = evenwicht

$$\left. \begin{array}{l} \text{N}_2: 0,070 \text{ M} \\ \text{O}_2: 0,070 \text{ M} \\ \text{NO}: 0,022 \text{ M} \end{array} \right\} K_c = Q_{c \text{ ev}} = \frac{[\text{NO}]_{\text{ev}}^2}{[\text{N}_2]_{\text{ev}} \cdot [\text{O}_2]_{\text{ev}}} = \frac{(22 \cdot 10^{-3})^2}{(70 \cdot 10^{-3}) \cdot (70 \cdot 10^{-3})} = 0,1$$

OK, evenwicht

Verhogen concentratie

$$\left. \begin{array}{l} \text{N}_2: 0,070 \text{ M} \\ \text{O}_2: 0,070 \text{ M} \\ \text{NO}: 0,022 \text{ M} \end{array} \right\} \text{N}_2: + 0,030 \text{ M}$$

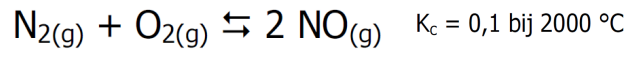
$$Q_c = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2] \cdot [\text{O}_2]} = \frac{(22 \cdot 10^{-3})^2}{(100 \cdot 10^{-3}) \cdot (70 \cdot 10^{-3})} = 0,07$$

**Q_c < K_c
verstoring naar rechts**

3. Veranderingen in reactiecondities 27

3.1 Verandering in concentratie

Evenwichtsc^e blijft gelijk, enkel nieuwe evenwichtsconcentraties
samenstelling



Verhogen concentratie

$Q_c < K_c$
verstoring naar rechts

$\left. \begin{array}{l} \text{N}_2: 0,070 \text{ M} \\ \text{O}_2: 0,070 \text{ M} \\ \text{NO}: 0,022 \text{ M} \end{array} \right\}$	$\text{N}_2: + 0,030 \text{ M}$	$Q_c = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2] \cdot [\text{O}_2]} = \frac{(22 \cdot 10^{-3})^2}{(100 \cdot 10^{-3}) \cdot (70 \cdot 10^{-3})} = 0,07$
---	---------------------------------	--

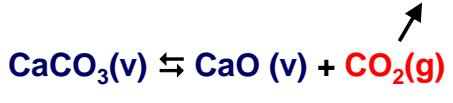
Nieuwe evenwichtssamenstelling ↓

$\left\{ \begin{array}{l} \text{N}_2: 0,098 \text{ M} \\ \text{O}_2: 0,068 \text{ M} \\ \text{NO}: 0,026 \text{ M} \end{array} \right.$	$K_c = Q_{c, \text{ev}} = \frac{[\text{NO}]_{\text{ev}}^2}{[\text{N}_2]_{\text{ev}} \cdot [\text{O}_2]_{\text{ev}}} = \frac{(22 \cdot 10^{-3})^{+2x}}{(100 \cdot 10^{-3}-x) \cdot (70 \cdot 10^{-3}-x)}$
$x = 0,002$	

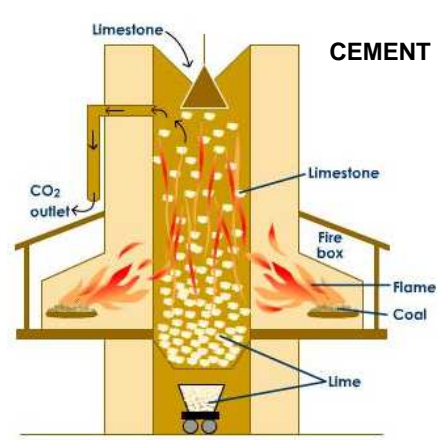
3. Veranderingen in reactiecondities 28

3.1 Verandering in concentratie

Evenwichtsc^e blijft gelijk, enkel nieuwe evenwichtsconcentraties
samenstelling



Wegnemen van een reactieproduct = nog meer vormen ervan



3. Veranderingen in reactiecondities 29

3.2 Verandering in druk (volume) GASSEN

Evenwichtsc^e blijft gelijk, enkel nieuwe evenwichtspartieeldrukken samenstelling



Begin = evenwicht 1,75 atm = Totaaldruk VAT

$$\left. \begin{array}{l} \text{PCl}_{5,\text{ev}}: 0,25 \text{ atm} \\ \text{PCl}_{3,\text{ev}}: 0,75 \text{ atm} \\ \text{Cl}_{2,\text{ev}}: 0,75 \text{ atm} \end{array} \right\} K_p = Q_{p,\text{ev}} = \frac{P_{\text{PCl}_3,\text{ev}} \cdot P_{\text{Cl}_2,\text{ev}}}{P_{\text{PCl}_5,\text{ev}}} = \frac{0,75 \cdot 0,75}{0,25} = 2,25$$

Verhogen druk (volume-verlaging) Volume gehalveerd = 3,5 atm $Q_p > K_p$
verstoring naar links

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{PCl}_5: 0,5 \text{ atm} \\ \text{PCl}_3: 1,5 \text{ atm} \\ \text{Cl}_2: 1,5 \text{ atm} \end{array} \right. \quad Q_p = \frac{P_{\text{PCl}_3} \cdot P_{\text{Cl}_2}}{P_{\text{PCl}_5}} = \frac{1,5 \cdot 1,5}{0,5} = 4,5$$

3. Veranderingen in reactiecondities 30

3.2 Verandering in druk (volume) GASSEN

Evenwichtsc^e blijft gelijk, enkel nieuwe evenwichtspartieeldrukken samenstelling



Verhogen druk (volume-verlaging) $Q_p > K_p$
verstoring naar links

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{PCl}_5: 0,5 \text{ atm} \\ \text{PCl}_3: 1,5 \text{ atm} \\ \text{Cl}_2: 1,5 \text{ atm} \end{array} \right. \quad Q_p = \frac{P_{\text{PCl}_3} \cdot P_{\text{Cl}_2}}{P_{\text{PCl}_5}} = \frac{1,5 \cdot 1,5}{0,5} = 4,5$$

Nieuwe evenwichtssamenstelling

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{PCl}_5: 0,724 \text{ atm} \\ \text{PCl}_3: 1,276 \text{ atm} \\ \text{Cl}_2: 1,276 \text{ atm} \end{array} \right. \quad K_p = Q_{p,\text{ev}} = \frac{P_{\text{PCl}_3,\text{ev}} \cdot P_{\text{Cl}_2,\text{ev}}}{P_{\text{PCl}_5,\text{ev}}} = \frac{1,5^{-x} \cdot 1,5^{-x}}{0,5^{+x}}$$

$$x = 0,224$$

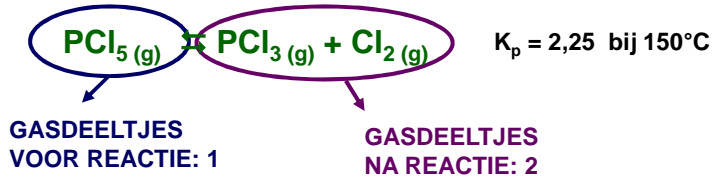
3. Veranderingen in reactiecondities

31

3.2 Verandering in druk (volume)

GASSEN

Evenwichtsc^e blijft gelijk, enkel nieuwe evenwichtspartieeldrukken samenstelling



Bij een **DRUKVERGROTING**, verschuift de reactie in de richting van het **KLEINSTE AANTAL DEELTJES**

Bij een **DRUKVERLAGING**, verschuift de reactie in de richting van het **GROOTSTE AANTAL DEELTJES**

DRUKverandering (volume-verandering)
= concentratieverandering

$$C = \frac{n}{V} = \frac{P}{R \cdot T}$$

3. Veranderingen in reactiecondities

32

3.3 Verandering in temperatuur

Evenwichtsc^e verandert, nieuwe evenwichtsconcentraties

$$\ln \frac{K_2}{K_1} = -\frac{\Delta H^0}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

- ➔ kennis van ΔH^0
- ➔ Inschatting van invloed T op evenwicht

Als $\Delta H^0 > 0$ Bij temperatuurstijging is $K_2 > K_1$ Rechts

Als $\Delta H^0 < 0$ Bij temperatuurstijging is $K_2 < K_1$ Links

3. Veranderingen in reactiecondities

33

3.3 Verandering in temperatuur

Evenwichtsc^te verandert, nieuwe evenwichtsconcentraties

Voorbeeld: $\text{N}_{2(\text{g})} + 3 \text{H}_{2(\text{g})} \rightleftharpoons 2 \text{NH}_{3(\text{g})}$ $\Delta H = -92,4 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

Temperatuur (K)	K_c	K_p
298	$3,3 \cdot 10^8$	$5,6 \cdot 10^5$
400	$3,9 \cdot 10^4$	$3,6 \cdot 10^1$
450	$2,6 \cdot 10^3$	1,9
500	$1,7 \cdot 10^2$	$1,0 \cdot 10^{-1}$
550	$2,6 \cdot 10^1$	$1,3 \cdot 10^{-2}$
600	4,1	$1,7 \cdot 10^{-3}$

3. Veranderingen in reactiecondities

34

3.3 Verandering in temperatuur

Evenwichtsc^te verandert, nieuwe evenwichtsconcentraties

$aA + bB + \text{ENERGIE} \rightleftharpoons cC + dD$ **ENDOTHERM PROCES ($\Delta H > 0$)**

⇒ bij **STIJGENDE TEMPERATUUR**

Verstoring van de reactie naar **RECHTS**

Verhoging van de evenwichtsconstante

$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD + \text{ENERGIE}$ **EXOTHERM PROCES ($\Delta H < 0$)**

⇒ bij **STIJGENDE TEMPERATUUR**

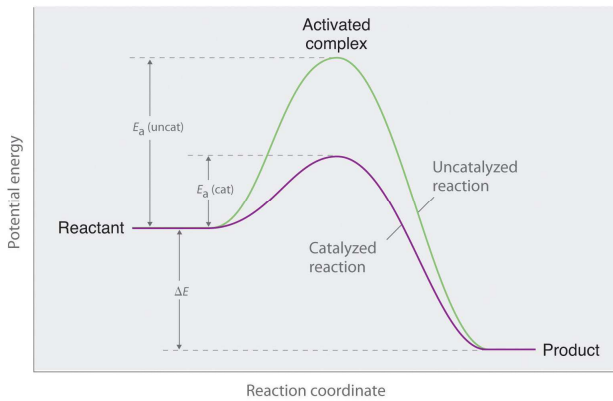
Verstoring van de reactie naar **LINKS**

Verlaging van de evenwichtsconstante

3. Veranderingen in reactiecondities

35

3.4 Effect van een katalysator



$$K_c = \frac{k_f}{k_r} = \frac{[NO_2]_{ev}^2}{[N_2O_4]_{ev}}$$

Inhibitor?

- * **Geen invloed op evenwicht**
- * **Invloed op snelheid: inspelen op potentiële energieberg**

3. Veranderingen in reactiecondities

36

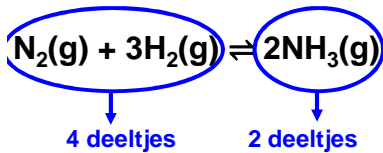
3.5 Samenvatting

Verandering	Richting van de reactie	Effect op K
Concentratie <ul style="list-style-type: none"> • [reagens] stijgt • [reagens] daalt • [product] stijgt • [product] daalt 	Naar productzijde Naar reagenszijde Naar reagenszijde Naar productzijde	Geen Geen Geen Geen
Druk <ul style="list-style-type: none"> • P stijgt (V daalt) • P daalt (V stijgt) • P stijgt (toevoeging inert gas, geen V verandering) 	Naar zijde met laagste mol gas Naar zijde met meeste mol gas Geen, concentratie ongewijzigd	Geen Geen Geen
Temperatuur <ul style="list-style-type: none"> • T stijgt • T daalt 	Naar zijde opname van warmte Naar zijde vrijgave van warmte	Stijging als $\Delta H > 0$ Daling als $\Delta H < 0$ Stijging als $\Delta H < 0$ Daling als $\Delta H > 0$
Katalysator	Geen, evenwicht wordt enkel sneller bereikt	Geen

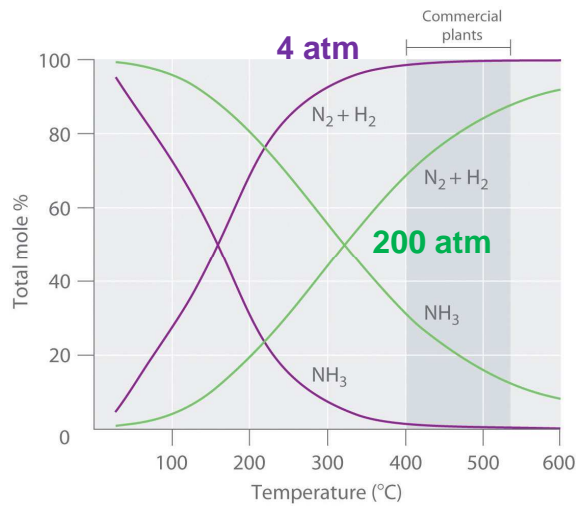
4. Optimalisatie opbrengst

37

HABER-BOSCH proces voor de bereiding van AMMONIAK



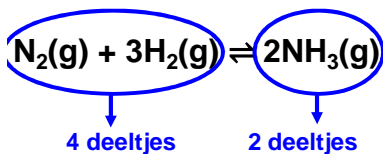
HOE ZORGEN VOOR
EEN GROOT
RENDEMENT ?



4. Optimalisatie opbrengst

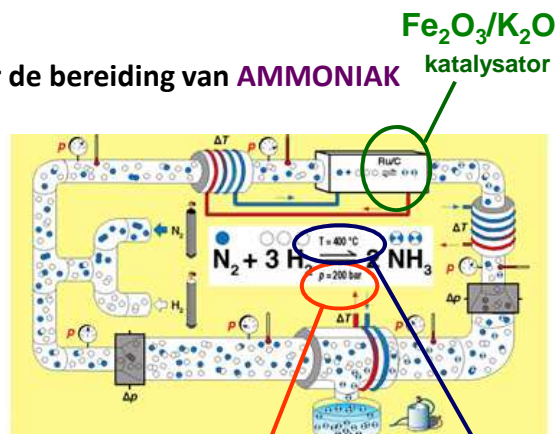
38

HABER-BOSCH proces voor de bereiding van AMMONIAK



$$\Delta H = -91.8 \text{ kJ/mol}$$

HOE ZORGEN VOOR
EEN GROOT
RENDEMENT ?



Hoge druk **Verstoring naar rechts**

temperatuur **Verstoring naar links**

4. Optimalisatie opbrengst

