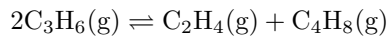


- A 2-butén $cisz \rightleftharpoons$ $transz$ izomerizációs reakciójának egyensúlyi állandója 400 K hőmérsékleten $K_a = 2,07$. Mennyi 400 K-en a tiszta 2-buténben a $cisz$ -, illetve a $transz$ izomer móltörtje? Adja meg a reakció standard szabadentalpia-változását ezen a hőmérsékleten!
- A kalcium-karbonát



egyenlet szerinti bomlási reakciójára 900 K-en $\Delta_r G^\ominus = 0,178 \text{ kJ mol}^{-1}$. Adja meg a reakció egyensúlyi állandóját!

- A (borneol \rightleftharpoons izoborneol) gázfázisú izomerizációs reakció standard szabadentalpia-változása 503 K hőmérsékleten $9,4 \text{ kJ mol}^{-1}$. Számolja ki a reakció szabadentalpia-változását, ha 0,15 mol borneolt és 0,30 mol izoborneolt mérünk össze 600 Torr össznyomáson!
- Mérések szerint a propilén

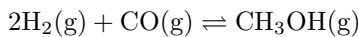


egyenlet szerinti bomlásának egyensúlyi állandóját a hőmérséklet függvényében 300 és 600 K között az

$$\ln K_a = -1,04 - \frac{1088}{T/K} + \frac{1,51 \cdot 10^5}{(T/K)^2}$$

tapasztalati képlet adja meg. Számítsa ki a standard entalpia- és entrópiaváltozás értékét 400 K-en!

- A

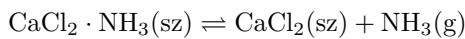


reakció egyensúlyi állandójának hőmérsékletfüggését 273 és 500 K között a következő egyenlet írja le:

$$\ln K_a = \frac{8574,8}{T/K} - 9,1298 \ln(T/K) + 7,092 \cdot 10^{-3} T/K + 30,883.$$

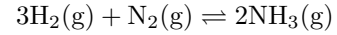
Számítsa ki a reakcióra K_a , $\Delta_r G^\ominus$, $\Delta_r H^\ominus$ és $\Delta_r S^\ominus$ értékét 390 K-en! A gázelegy az adott hőmérsékleten ideálisként kezelhető.

- A kalcium-klorid és az ammónia $CaCl_2 \cdot NH_3(s)$ összegképletű adduktja a



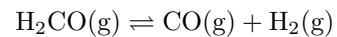
egyenlettel leírható reakcióban bomlik. A reakció standard entalpiaváltozása 350 és 446 K hőmérsékletek között közelítőleg állandó, $78,0 \text{ kJ mol}^{-1}$. A reakció standard szabadentalpia-változása 446 K-en $149,8 \text{ kJ mol}^{-1}$. Mennyi az egyensúlyi állandó, a standard szabadentalpia-változás és a standard entrópiaváltozás értéke 426 K-en?

- Számítsa ki, hány-szorosára változik meg az ammóniaszintézis



reakciójára K_x értéke, ha a nyomást állandó hőmérsékleten 1,0 barról 2,0 barra növeljük a reakcióedény össznyomásával!

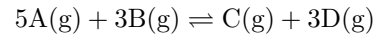
- Számítsa ki, hány-szorosára változik meg a



reakcióra K_x értéke, ha a nyomást állandó hőmérsékleten 2,0 barról 10,0 barra növeljük meg

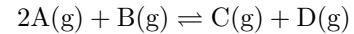
- a reakcióedény össznyomásával!
- inert gáz adagolásával!

- Az



gázfázisú reakció vizsgálata során azt találták, hogy 4,00 mol A-t, 2,75 mol B-t és 1,25 mol D-t összekeverve az egyensúlyi gázelegy 0,50 mol C-t tartalmazott 2,5 bar össznyomáson és 350 K-en. Számolja ki a reakció K_x és K_P egyensúlyi állandóját ezen a hőmérsékleten! Az egyensúlyi gázelegy ideálisként kezelhető.

- A



gázfázisú reakció vizsgálata során azt találták, hogy 1,00 mol A-t és 2 mol B-t összekeverve az egyensúlyi gázelegy 0,10 mol C-t tartalmazott 5 bar össznyomáson és 900 K-en. Számolja ki a reakció K_x és K_P egyensúlyi állandóját ezen a hőmérsékleten! Az egyensúlyi gázelegy ideálisként kezelhető.

Emlékeztetőül.

- Egy $\sum_i \nu_i A_i = 0$ reakcióra a *reakció szabadentalpia-változását* $\Delta_r G = \frac{\partial G(T,P,n)}{\partial \xi}$ alakban, vagyis a szabadentalpiának a reakciókoordináta (ξ) szerinti parciális deriváltjaként definiáljuk. Ha a rendszer egy adott állapotában a reagáló A_i komponensek a_i aktivitással vannak jelen, akkor felírható, hogy $\Delta_r G = \Delta_r G^\ominus + RT \ln \prod_i a_i^{\nu_i}$, és az ebben a kifejezésben megjelenő $\Delta_r G^\ominus$ mennyiséget a *reakció standard szabadentalpia-változásának* nevezzük.
- Ha egy rendszerben a $\sum_i \nu_i A_i = 0$ reakcióra vonatkozóan egyensúly áll fenn, akkor a reakció szabadentalpia-változása zérus. Ebben az esetben az $a_{i,eq}$ aktivitásokkal felírható az ún. *egyensúlyi állandó* $K_a = \prod_i a_{i,eq}^{\nu_i}$ alakban, és $\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K_a$.
- Egy reakció szabadentalpia-változására érvényes a $\Delta_r G = \Delta_r H - T \Delta_r S$ összefüggés; és ugyanez a standard mennyiségekre is felírható: $\Delta_r G^\ominus = \Delta_r H^\ominus - T \Delta_r S^\ominus$. $\Delta_r H^\ominus$ -t a reakció *entalpiaváltozásának*, $\Delta_r H^\ominus$ -t a reakció *standard entalpiaváltozásának*, $\Delta_r S^\ominus$ -t a reakció *entrópiaváltozásának*, $\Delta_r S^\ominus$ -t a reakció *standard entrópiaváltozásának* nevezzük. Ne feledjük, hogy $\Delta_r S = -\frac{\partial \Delta_r G}{\partial T}$, és, hogy $\Delta_r S^\ominus = -\frac{\partial \Delta_r G^\ominus}{\partial T}$.
- A fenti Gibbs–Helmholtz-egyenletről levezethető az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggését leíró $\frac{d \ln K_a}{dT} = \frac{\Delta_r H^\ominus}{RT^2}$ alakú, *differenciális van't Hoff-egyenlet*. Ha feltételezzük, hogy $\Delta_r H^\ominus$ értéke független a hőmérséklettől, az egyenlet integrális formáját is előállíthatjuk. Ekkor két különböző (T_1 és T_2) hőmérsékletre vonatkozóan a megfelelő (K_{a1} és K_{a2}) egyensúlyi állandók az $\ln \left(\frac{K_{a2}}{K_{a1}} \right) = \frac{\Delta_r H^\ominus}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$ egyenletről számolhatók.
- A kémiai egyensúly megzavarásával kapcsolatos általános tapasztalati törvényszerűség a legkisebb kényszer elve, amit *Le Chatelier-elvnek* is neveznek. Ennek értelmében ha egy egyensúlyi rendszert valamilyen külső hatás ér, abban olyan folyamatok erősödnek fel, amelyek a zavaró hatást kompenzálni igyekeznek.

Néhány példa megoldása.

1. feladat. A móltörtökre felírható

$$K_a = \frac{x_{\text{transz}}}{x_{\text{cisz}}} = \frac{x_{\text{transz}}}{1 - x_{\text{transz}}}$$

egyenletből $x_{\text{transz}} = 0,674$ és $x_{\text{cisz}} = 0,326$. A reakció standard szabadentalpia-változására a

$$\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K_a$$

egyenletből $\Delta_r G^\ominus = -2,42 \text{ kJ mol}^{-1}$ értéket kapunk. Figyeljünk az előjel és a mértékegység helyes megadására!

3. feladat. A (borneol \rightleftharpoons izoborneol) egyenletre vonatkozóan a megoldás $\Delta_r G = \Delta_r G^\ominus + RT \ln \frac{P_{\text{izoborneol}}}{P_{\text{borneol}}}$ alakban írható fel. Tekintve, hogy a bemért anyagmennyiségek, és így a 600 torr össznyomást meghatározó parciális nyomások is ismertek ($P_{\text{borneol}} = 200 \text{ torr}$ és $P_{\text{izoborneol}} = 400 \text{ torr}$), kiszámítható, hogy $\Delta_r G = 12,3 \text{ kJ mol}^{-1}$. A spontán átalakulás iránya tehát a bal (a felírt egyenletnek megfelelően).

4. feladat. Az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggését megadó kifejezésből $\Delta_r G^\ominus = -RT \left[-1,04 - \frac{1088}{T/K} + \frac{1,51 \cdot 10^5}{(T/K)^2} \right]$. Ebből $\Delta_r S^\ominus = -\frac{\partial \Delta_r G^\ominus}{\partial T} = R \left(-1,04 - \frac{1,51 \cdot 10^5}{(T/K)^2} \right)$. Beírva a hőmérséklet $T = 400 \text{ K}$ értékét, $\Delta_r G^\ominus = 9,365 \text{ kJ mol}^{-1}$ -t és $\Delta_r S^\ominus = -16,49 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ -t kapunk. Ebből $\Delta_r H^\ominus = \Delta_r G^\ominus + T \Delta_r S^\ominus = 2,769 \text{ kJ mol}^{-1}$.

7. feladat. A feladat szövegében adott reakcióegyenletben a gázmolekulák száma 4-ről 2-re csökken; a Le Chatelier-elv értelmében tehát a nyomás növelése a termékeknek kedvez: $K_P = \frac{P_{\text{NH}_3}^2}{P_{\text{N}_2} P_{\text{H}_2}^3} = \frac{(x_{\text{NH}_3} P)^2}{(x_{\text{N}_2} P)(x_{\text{H}_2} P)^3} = \frac{K_x}{P^2}$. Mivel K_P nem változik a nyomással, K_x -nek négyszeresére kell nőnie, ha a nyomást kétszeresére növeljük. (Ideális gáz közelítésben számoltunk.)

9. feladat. A keletkező C anyagmennyiségéből a sztöchiometriai számok alapján kiszámíthatók az egyensúlyi anyagmennyiségek, majd ebből a móltörtök, illetve – az össznyomás felhasználásával – a parciális nyomások:

	A	B	C	D
n/mol	1,50	1,25	0,50	2,75
x	0,25000	0,20833	0,08333	0,45833
P/bar	0,62500	0,52083	0,20832	1,14575

Ezekből

$$K_x = \frac{x_D^3 x_C}{x_A^5 x_B^3} = 908,63$$

és

$$K_P = \frac{P_D^3 P_C}{P_A^5 P_B^3} = 23,26 \text{ bar}^{-4}.$$

Vegyük észre, hogy K_P értéke a $K_P = P^{-4} K_x$ egyenletből is kiszámítható.