

Príklad: Uvažujme o reakcii plynov, konkrétne oxidu siričitého a chlóru za vzniku sulfurylchloridu (alebo chlorid surfurilu), čo vyjadruje reakcia $\text{SO}_2(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{SO}_2\text{Cl}_2(\text{g})$. Hodnota rovnovážnej konštanty je $K_c = 4$. Východiskový (počiatočný) stav reakčnej zmesi charakterizujú nasledovné množstvá jednotlivých komponentov: 4 moly SO_2 , 2 moly Cl_2 a 12 molov SO_2Cl_2 . Aké bude zloženie zmesi v rovnováhe?

Riešenie:

Definujme zmenu vzhľadom na rovnovážny stav. Skúsme posunúť reakciu doľava (tento predpoklad overíme neskôr) o x molov, čo znamená, že x molov SO_2Cl_2 sa rozloží za vzniku x molov SO_2 aj Cl_2 .

komponent	začiatok (mol)	zmena (mol)	rovnováha (mol)
SO_2	4	$+x$	$4 + x$
Cl_2	2	$+x$	$2 + x$
SO_2Cl_2	12	$-x$	$12 - x$

Rovnovážna konštanta je daná vzťahom:

$$K_c = \frac{[\text{SO}_2\text{Cl}_2]}{[\text{SO}_2][\text{Cl}_2]} = 4.0$$

Keďže narábame s jednotkami mol a konštantným objemom plynnej zmesi, uvažované hodnoty môžeme vnímať ako koncentrácie. Po dosadení do vzorca dostávame:

$$4 = \frac{12 - x}{(4 + x)(2 + x)}$$

Vzťah ďalej upravíme:

$$4(4 + x)(2 + x) = 12 - x$$

$$4(8 + 6x + x^2) = 12 - x$$

$$32 + 24x + 4x^2 = 12 - x$$

$$4x^2 + 25x + 20 = 0$$

Dostávame kvadratickú rovnicu ktorú riešime:

$$x = \frac{-25 \pm \sqrt{25^2 - 4(4)(20)}}{2(4)}$$

$$x = \frac{-25 \pm \sqrt{625 - 320}}{8} = \frac{-25 \pm \sqrt{305}}{8}$$

$$x = \frac{-25 \pm 17.46}{8} \quad \sqrt{305} \approx 17.46$$

Výsledkom sú dve rôzne hodnoty x :

$$x_1 = \frac{-25+17.46}{8} = \frac{-7.54}{8} = -0.9425$$

$$x_2 = \frac{-25-17.46}{8} = \frac{-42.46}{8} = -5.31$$

Kedže obe hodnoty sú záporné, náš predpoklad o priebehu reakcie smerom vľavo bol nesprávny. Ak sa reakcia posúva doľava (SO_2Cl_2 sa rozkladá) hodnota x musí byť kladná, z čoho vyplýva, že reakcia sa posúva vpravo (množstvo SO_2Cl_2 narastá). Čiže opäť budeme vychádzať zo schémy ako na začiatku, s tým rozdielom, že predpokladáme priebeh reakcie opačným smerom (tým sa zmení znamienko pre neznámu v rovnici, ktorú teraz označíme y).

zložka začiatok (mol) zmena (mol) rovnováha (mol)			
SO_2	4	$-y$	$4 - y$
Cl_2	2	$-y$	$2 - y$
SO_2Cl_2	12	$+y$	$12 + y$

Čiže výraz bude mať tvar:

$$4 = \frac{12 + y}{(4 - y)(2 - y)}$$

Opäť ho upravíme do kvadratického tvaru:

$$4(8 - 6y + y^2) = 12 + y$$

$$32 - 24y + 4y^2 = 12 + y$$

$$4y^2 - 25y + 20 = 0$$

A vypočítame y_1 a y_2 :

$$y = \frac{25 \pm \sqrt{25^2 - 4(4)(20)}}{2(4)} = \frac{25 \pm \sqrt{625 - 320}}{8} = \frac{25 \pm 17.46}{8}$$

$$y_1 = \frac{25 - 17.46}{8} = 0.9425, \quad y_2 = \frac{25 + 17.46}{8} = 5.31$$

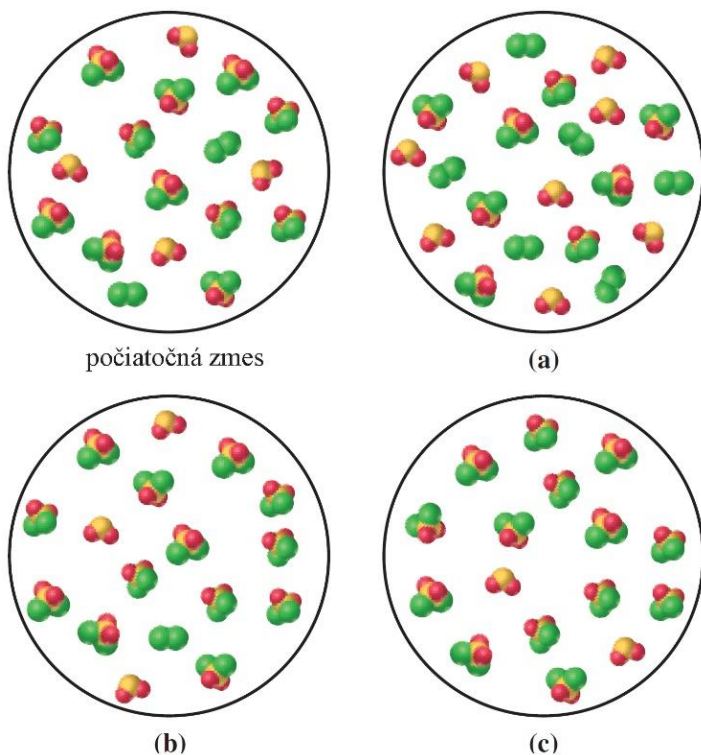
Kedže y nemôže presiahnuť najmenšie počiatočné množstvo reaktantu ($\text{Cl}_2 = 2 \text{ mol}$), platná hodnota je $y = 0.9425$. Pomocou nej vypočítame zloženie zmesi v rovnováhe:

$$n(\text{SO}_2) = 4 - y = 4 - 0.9425 = 3.06 \text{ mol}$$

$$n(\text{Cl}_2) = 2 - y = 2 - 0.9425 = 1.06 \text{ mol}$$

$$n(\text{SO}_2\text{Cl}_2) = 12 + y = 12 + 0.9425 = 12.94 \text{ mol}$$

Odpoveď na otázku by sa hľadala ľahšie, ak by sme vyberali z konkrétnych možností. Uvažujme opäť o rovnakej reakcii ($\text{SO}_2(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{SO}_2\text{Cl}_2(\text{g})$, $K_c = 4$) s rovnakými množstvami troch látok na začiatku. Povedzme, že máme dané počiatočné množstvá: 2 moly Cl_2 , 4 moly SO_2 a 12 molov SO_2Cl_2 . Vyberme jednu z nasledovných možností, ktorá správne vyjadruje množstvá komponentov v rovnováhe. Možnosť a) 6 molov Cl_2 , 8 molov SO_2 a 8 molov SO_2Cl_2 ; Možnosť b) 1 mol Cl_2 , 3 moly SO_2 a 13 molov SO_2Cl_2 ; Možnosť c) 0 molov Cl_2 , 2 moly SO_2 a 14 molov SO_2Cl_2 . Situáciu ilustruje nasledovný obrázok, kde jedna zobrazená molekula reprezentuje 1 mol látky:



Opäť vychádzame zo vzťahu pre rovnovážnu konštantu reakcie, do ktorej dosadíme látkové množstvá jednotlivých zložiek z troch možností a správnosť nám indikuje výsledná hodnota pomeru, ktorá musí byť rovná 4.

$$K = \frac{n(\text{SO}_2\text{Cl}_2)}{n(\text{SO}_2) n(\text{Cl}_2)}$$

$$\frac{n_3}{n_1 n_2} = 4$$

Možnosť **(a)** $\text{Cl}_2 = 6$, $\text{SO}_2 = 8$, $\text{SO}_2\text{Cl}_2 = 8$

$$K = \frac{8}{(8)(6)} = \frac{8}{48} = \frac{1}{6} \approx 0.17 \neq 4$$

Možnosť **(b)** $\text{Cl}_2 = 1$, $\text{SO}_2 = 3$, $\text{SO}_2\text{Cl}_2 = 13$

$$K = \frac{13}{(3)(1)} = \frac{13}{3} \approx 4.33$$

➔ pravdepodobne správna možnosť.

Možnosť **(c)** $\text{Cl}_2 = 0$, $\text{SO}_2 = 2$, $\text{SO}_2\text{Cl}_2 = 14$

$$K = \frac{14}{(2)(0)} = \text{numericky nedefinovaná hodnota} \rightarrow \infty$$

To by znamenalo, že reakcia prebehne úplne (nezostanú žiadne reaktanty), čo je v rozpore s hodnotou $K_c = 4$. Čiže, možnosť **(b)** je správna odpoveď.