

Voor de reactie $2 \text{NO}(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NOCl}(\text{g})$ is $K_C = 4,6 \cdot 10^4 \text{ (mol}^{-1} \cdot \text{L)}$.

Schrijf de betrekking op om de evenwichtsconcentraties te berekenen, vertrekkende van

- 2,0 mol zuiver $\text{NOCl}(\text{g})$ in een vat van 1,00 L,
- 4,0 mol $\text{NO}(\text{g})$ en 2,0 mol $\text{Cl}_2(\text{g})$ in een vat van 0,50 L,
- 2,0 mol/L $\text{NO}(\text{g})$ en 2,0 mol/L $\text{NOCl}(\text{g})$,
- 2,0 mol/L $\text{NO}(\text{g})$, 2,0 mol/L $\text{Cl}_2(\text{g})$ en 2,0 mol/L $\text{NOCl}(\text{g})$,
- 1,0 mol $\text{NO}(\text{g})$, 1,0 mol $\text{Cl}_2(\text{g})$ en 2,0 mol $\text{NOCl}(\text{g})$ in een vat van 2,0 L.

Oplossing

$$K_C = \frac{[\text{NOCl}(\text{g})]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO}(\text{g})]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]_{\text{ev}}} = 4,6 \cdot 10^4 \left(\frac{\text{L}}{\text{mol}} \right)$$

a)

mol/L	$\text{NO}(\text{g})$	$\text{Cl}_2(\text{g})$	$\text{NOCl}(\text{g})$
Begin	0	0	2,0

Er kan in dit geval enkel een reactie naar links doorgaan: er is geen $\text{NO}(\text{g})$ en geen $\text{Cl}_2(\text{g})$ aanwezig in het begin, enkel $\text{NOCl}(\text{g})$.

Δ	+ 2 x	+ x	- 2 x
Evenwicht	2 x	x	2,0 - 2 x

$$K_C = \frac{[\text{NOCl}(\text{g})]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO}(\text{g})]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]_{\text{ev}}} = \frac{(2,0 - 2x)^2}{(2x)^2 \times x} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$\frac{4x^2 - 8,0x + 4,0}{4x^3} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$1,84 \cdot 10^5 x^3 - 4x^2 + 8,0x - 4,0 = 0 \text{ (vergelijking van de derde graad)}$$

Het manueel oplossen van deze vergelijking is tijdrovend. Met een aangepast rekenprogramma vinden we dat deze vergelijking slechts één reële oplossing heeft: $x = 0,02740$.

mol/L	$\text{NO}(\text{g})$	$\text{Cl}_2(\text{g})$	$\text{NOCl}(\text{g})$
Evenwicht	0,05479	0,02740	1,94521

Controle

$$\frac{[\text{NOCl}(\text{g})]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO}(\text{g})]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]_{\text{ev}}} = \frac{(1,94521)^2}{(0,05479)^2 \times 0,02740} \approx 4,6 \cdot 10^4$$

b)

mol/L	NO(g)	Cl ₂ (g)	NOCl(g)
Begin	8,0	4,0	0

Er kan in dit geval enkel een reactie naar rechts doorgaan: er is geen NOCl(g), maar wel NO(g) en Cl₂(g) aanwezig in het begin.

Δ	- 2 x	- x	+ 2 x
Evenwicht	8,0 - 2 x	4,0 - x	2 x

$$K_c = \frac{[\text{NOCl(g)}]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO(g)}]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]_{\text{ev}}} = \frac{(2x)^2}{(8,0 - 2x)^2 \times (4,0 - x)} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$\frac{4x^2}{-4,0x^3 + 48,0x^2 - 192,0x + 256,0} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$1,84 \cdot 10^5 x^3 - 2,207996 \cdot 10^6 x^2 + 8,832 \cdot 10^6 x - 1,1776 \cdot 10^7 = 0 \text{ (vergelijking van de derde graad)}$$

$$\mathbf{x^3 - 11,999978 x^2 + 48 x - 64 = 0}$$

Het manueel oplossen van deze vergelijking is tijdrovend. Met een aangepast rekenprogramma vinden we dat deze vergelijking slechts één reële oplossing heeft: $x = 3,93022$.

mol/L	NO(g)	Cl ₂ (g)	NOCl(g)
Evenwicht	0,13956	0,06978	7,86044

Controle

$$\frac{[\text{NOCl(g)}]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO(g)}]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]_{\text{ev}}} = \frac{(7,86044)^2}{(0,13956)^2 \cdot 0,06978} \approx 4,6 \cdot 10^4$$

c)

mol/L	NO(g)	Cl ₂ (g)	NOCl(g)
Begin	2,0	0	2,0

Er kan in dit geval enkel een reactie naar links doorgaan: er is wel NO(g), maar geen Cl₂(g) aanwezig in het begin.

Δ	+ 2 x	+ x	- 2 x
Evenwicht	2,0 + 2 x	x	2,0 - 2 x

$$K_c = \frac{[\text{NOCl(g)}]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO(g)}]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]_{\text{ev}}} = \frac{(2,0 - 2x)^2}{(2,0 + 2x)^2 \cdot x} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$\frac{4x^2 - 8,0x + 4,0}{4x^3 + 8,0x^2 + 4,0x} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$1,84 \cdot 10^5 x^3 + 3,67996 \cdot 10^5 x^2 + 1,84008 \cdot 10^5 x - 4,0 = 0 \text{ (vergelijking van de derde graad)}$$

$$x^3 + 1,9999783 x^2 + 1,00004 x - 2,17391 \cdot 10^{-5} = 0$$

Het manueel oplossen van deze vergelijking is tijdrovend. Met een aangepast rekenprogramma vinden we dat deze vergelijking slechts één reële oplossing heeft: $x = 2,17373 \cdot 10^{-5}$.

mol/L	NO(g)	Cl ₂ (g)	NOCl(g)
Evenwicht	2,0000435	2,17373 · 10 ⁻⁵	1,9999565

Controle

$$\frac{[\text{NOCl(g)}]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO(g)}]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]_{\text{ev}}} = \frac{(1,9999565)^2}{(2,0000435)^2 \times 2,17373 \cdot 10^{-5}} \approx 4,6 \cdot 10^4$$

d)

mol/L	NO(g)	Cl ₂ (g)	NOCl(g)
Begin	2,0	2,0	2,0

Er kan in dit geval niet zomaar voorspeld worden in welke zin de reactie plaatsheeft. Dit kan pas na het berekenen van de concentratiequotiënt Q .

$$Q = \frac{[\text{NOCl(g)}]^2}{[\text{NO(g)}]^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]} = \frac{(2,0)^2}{(2,0)^2 \times 2,0} = 0,50$$

$Q (= 0,50)$ is dus kleiner dan $K_c (= 4,6 \cdot 10^4)$. Er zal dus een reactie naar rechts plaatsgrijpen, waardoor Q stijgt (tot Q gelijk is aan $K_c = 4,6 \cdot 10^4$).

Δ	- 2 x	- x	+ 2 x
Evenwicht	2,0 - 2 x	2,0 - x	2,0 + 2 x

$$K_c = \frac{[\text{NOCl(g)}]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO(g)}]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]_{\text{ev}}} = \frac{(2,0 + 2x)^2}{(2,0 - 2x)^2 \times (2,0 - x)} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$\frac{4x^2 + 8,0x + 4,0}{-4x^3 + 16,0x^2 + 20,0x + 8,0} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$1,84 \cdot 10^5 x^3 - 7,35996 \cdot 10^5 x^2 + 9,20008 \cdot 10^5 x - 3,67996 \cdot 10^5 = 0 \text{ (vergelijking van de derde graad)}$$

$$x^3 - 3,9999783 x^2 + 5,0000435 x - 1,9999783 = 0$$

Het manueel oplossen van deze vergelijking is tijdrovend. Met een aangepast rekenprogramma vinden we dat deze vergelijking slechts drie reële oplossingen heeft: $x = 0,99076$, $x = 1,00941$ en $x = 1,99980$. Vermits x kleiner moet zijn dan 1, is enkel de eerste oplossing chemisch aanvaardbaar.

mol/L	NO(g)	Cl ₂ (g)	NOCl(g)
Evenwicht	0,01848	1,00924	3,98152

Controle

$$\frac{[\text{NOCl(g)}]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO(g)}]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2(\text{g})]_{\text{ev}}} = \frac{(3,98152)^2}{(0,01848)^2 \times 1,00924} \approx 4,6 \cdot 10^4$$

e)

mol/L	NO(g)	Cl ₂ (g)	NOCl(g)
Begin	0,5	0,5	1,0

Er kan in dit geval niet zomaar voorspeld worden in welke zin de reactie plaatsheeft. Dit kan pas na het berekenen van de concentratiequotiënt Q .

$$Q = \frac{[\text{NOCl(g)}]^2}{[\text{NO(g)}]^2 \times [\text{Cl}_2\text{(g)}]} = \frac{(1,0)^2}{(0,5)^2 \times 0,5} = 8,0$$

$Q (= 8,0)$ is dus kleiner dan $K_C (= 4,6 \cdot 10^4)$. Er zal dus een reactie naar rechts plaatsgrijpen, waardoor Q stijgt (tot Q gelijk is aan $K_C = 4,6 \cdot 10^4$).

Δ	- 2 x	- x	+ 2 x
Evenwicht	0,5 - 2 x	0,5 - x	1,0 + 2 x

$$K_C = \frac{[\text{NOCl(g)}]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO(g)}]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2\text{(g)}]_{\text{ev}}} = \frac{(1,0 + 2x)^2}{(0,5 - 2x)^2 \times (0,5 - x)} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$\frac{4x^2 + 4,0x + 1,0}{-4x^3 + 4,0x^2 - 1,25x + 0,125} = 4,6 \cdot 10^4$$

$$1,84 \cdot 10^5 x^3 - 1,83996 \cdot 10^5 x^2 + 5,7504 \cdot 10^4 x - 5,749 \cdot 10^3 = 0 \text{ (vergelijking van de derde graad)}$$

$$x^3 - 0,999978 x^2 + 0,312522 x - 0,0312446 = 0$$

Het manueel oplossen van deze vergelijking is tijdrovend. Met een aangepast rekenprogramma vinden we dat deze vergelijking slechts drie reële oplossingen heeft: $x = 0,257179$, $x = 0,499649$ en $x = \mathbf{0,243151}$. Vermits x kleiner moet zijn dan 0,25, is enkel de derde oplossing chemisch aanvaardbaar.

mol/L	NO(g)	Cl ₂ (g)	NOCl(g)
Evenwicht	0,013698	0,256849	1,486302

Controle

$$\frac{[\text{NOCl(g)}]_{\text{ev}}^2}{[\text{NO(g)}]_{\text{ev}}^2 \times [\text{Cl}_2\text{(g)}]_{\text{ev}}} = \frac{(1,486302)^2}{(0,013698)^2 \times 0,256849} = 4,6 \cdot 10^4$$