

Stikstofmonoxide NO en koolstofmonoxide CO zijn polluerende gassen aanwezig in de uitlaatgassen van auto's. Er werd gesuggereerd dat men beide gassen zou kunnen laten reageren, waarbij dan de niet-polluerende gassen N₂ en CO₂ zouden ontstaan.

- Schrijf de reactievergelijking.
- Schrijf de uitdrukking voor de evenwichtsconstante.
- Bereken de evenwichtsconstante bij 25°C.
- Als alle gassen samengebracht worden met een partiële druk van 1 bar, in welke richting gaat de reactie dan?
- In een stadsomgeving zijn volgende partiële drukkens typisch:

Gas	P (bar)
N ₂	0,804
CO ₂	$3,4 \cdot 10^{-4}$
NO	$5,7 \cdot 10^{-7}$
CO	$5,7 \cdot 10^{-5}$

In welke richting verloopt de reactie bij 25°C?

- Verklaar (zonder berekeningen uit te voeren) of de evenwichtsconstante, bij de veel hogere temperaturen van de uitlaatgassen van een wagen, groter, kleiner of gelijk is aan deze bij 25°C.

Gegevens

	N ₂ (g)	CO ₂ (g)	NO(g)	CO(g)
$\Delta_f H^\circ \left(\frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right)$	0	-393,5	+91,3	-110,5
$S^\circ \left(\frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \right)$	+191,6	+213,8	+210,8	+197,7

Oplossing

a)



b)

$$K_p = \frac{P_{\text{N}_2(\text{g})_{\text{ev}}} \cdot P_{\text{CO}_2(\text{g})_{\text{ev}}}^2}{P_{\text{NO}(\text{g})_{\text{ev}}}^2 \cdot P_{\text{CO}(\text{g})_{\text{ev}}}^2}$$

c)

$$\begin{aligned}\Delta_r H^\circ &= \left(\Delta_f H^\circ_{\text{N}_2(\text{g})} + 2 \cdot \Delta_f H^\circ_{\text{CO}_2(\text{g})} \right) - \left(2 \cdot \Delta_f H^\circ_{\text{NO}(\text{g})} + 2 \cdot \Delta_f H^\circ_{\text{CO}(\text{g})} \right) \\ &= \left(0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} + 2 \cdot (-393,5 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}) \right) - \left(2 \cdot (91,3 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}) + 2 \cdot (-110,5 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}) \right) \\ &= -748,6 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \\ \Delta_r S^\circ &= \left(S^\circ_{\text{N}_2(\text{g})} + 2 \cdot S^\circ_{\text{CO}_2(\text{g})} \right) - \left(2 \cdot S^\circ_{\text{NO}(\text{g})} + 2 \cdot S^\circ_{\text{CO}(\text{g})} \right) \\ &= \left(191,6 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} + 2 \cdot (213,8 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}) \right) - \left(2 \cdot (210,8 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}) + 2 \cdot (197,7 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}) \right) \\ &= -197,8 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \\ \Delta_r G^\circ &= \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ \\ &= -748,6 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - 298\text{K} \cdot (-197,8 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}) \\ &= -748600 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + 58944 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \\ &= -689656 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \\ &= -689,656 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}\end{aligned}$$

$$\Delta_r G^\circ = -RT \ln K_p$$

$$\ln K_p = -\frac{\Delta_r G^\circ}{RT}$$

$$\begin{aligned}\rightarrow \ln K_p &= -\frac{-689656 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298\text{K}} \\ &= 278\end{aligned}$$

$$K_p = 5,4 \cdot 10^{120}$$

d)

Als alle gassen samengebracht worden met een partiële druk van 1 bar, dan is:

$$Q = \frac{P_{\text{N}_2(\text{g})} \times P_{\text{CO}_2(\text{g})}^2}{P_{\text{NO}(\text{g})}^2 \times P_{\text{CO}(\text{g})}^2} = \frac{1 \times (1)^2}{(1)^2 \times (1)^2} = 1$$

Q is dus veel kleiner dan K_p : de reactie gaat dus **naar rechts** door (zo goed als aflopende reactie).

e)

In een stadsomgeving met typische partiële drukken is:

$$Q = \frac{P_{\text{N}_2(\text{g})} \times P_{\text{CO}_2(\text{g})}^2}{P_{\text{NO}(\text{g})}^2 \times P_{\text{CO}(\text{g})}^2} = \frac{0,804 \times (3,4 \cdot 10^{-4})^2}{(5,7 \cdot 10^{-7})^2 \times (5,7 \cdot 10^{-5})^2} = 8,8 \cdot 10^{13}$$

Ook in stadsomstandigheden is Q dus kleiner dan K_p : de reactie gaat dus **naar rechts**.

f)

$\Delta_r H^\circ = -748,6 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$ (zie § c). De reactie is dus exotherm. Dit heeft voor gevolg dat het evenwicht naar links verschuift als we de temperatuur verhogen en dat de evenwichtsconstante bij de hogere temperatuur van de uitlaatgassen dus **kleiner** is.