

CHEMICKÉ ROVNOVÁHY

Podmínky ustálení chemické rovnováhy:

Guldberg Waage
(1863)

- 1) Reakce musí být zvrátaná
- 2) za časovou jednotku vznikne právě tolik produktu, jako se jich rozpadne.

Pro reakci $\alpha A + \beta B \rightleftharpoons \gamma C + \delta D$ definujeme rovnovážnou konstantu K_c (K_a):

$$K_c = \frac{[C]^\gamma \cdot [D]^\delta}{[A]^\alpha \cdot [B]^\beta}$$

$$K_a = \frac{a_C^\gamma \cdot a_D^\delta}{a_A^\alpha \cdot a_B^\beta}$$

$[A], [B], [C], [D] \dots$ rovnovážné koncentrace složek

$\alpha, \beta, \gamma, \delta \dots$ stechiometrické koeficienty

$a_A, a_B, a_C, a_D \dots$ aktivity složek

Afinita \bar{A} chemické reakce: (T. de Donder, 1922)

$$\bar{A} = -\sum_i \mu_i \nu_i$$

$\mu_i \dots$ chem. potenciál i -té složky

$\nu_i \dots$ obecný symbol stechiometrického koeficientu i -té látky.

$$\nu_A = -\alpha, \nu_B = -\beta, \nu_C = \gamma, \nu_D = \delta$$

Obecný zápis chem. reakce:

$$\sum_i \nu_i L_i$$

$L_i \dots$ obecný symbol pro látku

Pro izotermicko - izobarický děj: $\bar{A} = -\Delta G_r [T, p]$

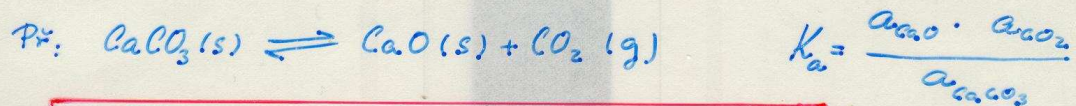
$\Delta G_r < 0 \Rightarrow \bar{A} > 0$... reakce samovolně běží zleva doprava
 $\Delta G_r > 0 \Rightarrow \bar{A} < 0$... -"- -"- -"- zprava doleva
 $\Delta G_r = 0 \Rightarrow \bar{A} = 0$... chem. rovnováha (reakce běží oběma směry stejnou rychlostí) *

Van't Hoffova reakční izoterma: $\Delta G_r^\circ = -RT \ln K_a$

V případě zředěného roztoku lze místo aktivit dosadit koncentrace: $\Delta G_r^\circ = -RT \ln K_c$.

**

Rovnováha v heterogenní reakční soustavě



Aktivity pevných látek v rovnováze jsou jednotkové. $a(\text{s}) = 1$

Tedy $K_a = a_{\text{CO}_2}^{\text{rov}}$ $a = \frac{\mu_r}{\mu_{\text{ST}}}$

! to vysvětluje, proč roztád CaCO_3 na vzduchu, když CO_2 uniká (otevřená soustava) je úplný;

v uzavřené soustavě roztád ustane, když koncentrace (tlak) CO_2 dosáhne obnosoty odpovídající rovnováze při dané teplotě

! v heterogenních soustav se kromě podmínky pro chemickou rovnováhu $\sum_i \nu_i \mu_i = 0$ musí brát i podmínka pro fázovou rovnováhu $\mu_i^{f_1} = \mu_i^{f_2} = \dots$

