# 专题十八 化学平衡的定量计算

角度1　平衡常数表达式的应用

**真题例析**

**例1** [全国甲2022·28节选]TiO2转化为TiCl4有直接氯化法和碳氯化法。在1 000 ℃时反应的热化学方程式及其平衡常数如下：

(ⅰ)直接氯化：

TiO2(s)＋2Cl2(g)===TiCl4(g)＋O2(g)　Δ*H*1＝172 kJ·mol－1 ，*K*p1＝1.0×10－2

(ⅱ)碳氯化：

TiO2(s)＋2Cl2(g)＋2C(s)===TiCl4(g)＋2CO(g)　Δ*H*2＝－51 kJ·mol－1，*K*p2＝1.2×1012 Pa

反应2C(s)＋O2(g)===2CO(g)的Δ*H*为\_\_\_\_\_\_\_\_kJ·mol－1, *K*p＝\_\_\_\_\_\_\_\_Pa。

**解析** 根据盖斯定律知，2C(s)＋O2(g)===2CO(g)可由反应 ⅱ 减去反应 ⅰ 得到，则Δ*H*＝Δ*H*2－Δ*H*1＝－223 kJ·mol－1。

根据“Δ*H*相加， *K*值相乘；Δ*H*相减，*K*值相除”的规律计算：*K*p＝＝＝1.2×1014 Pa。

**答案** －223　1.2×1014

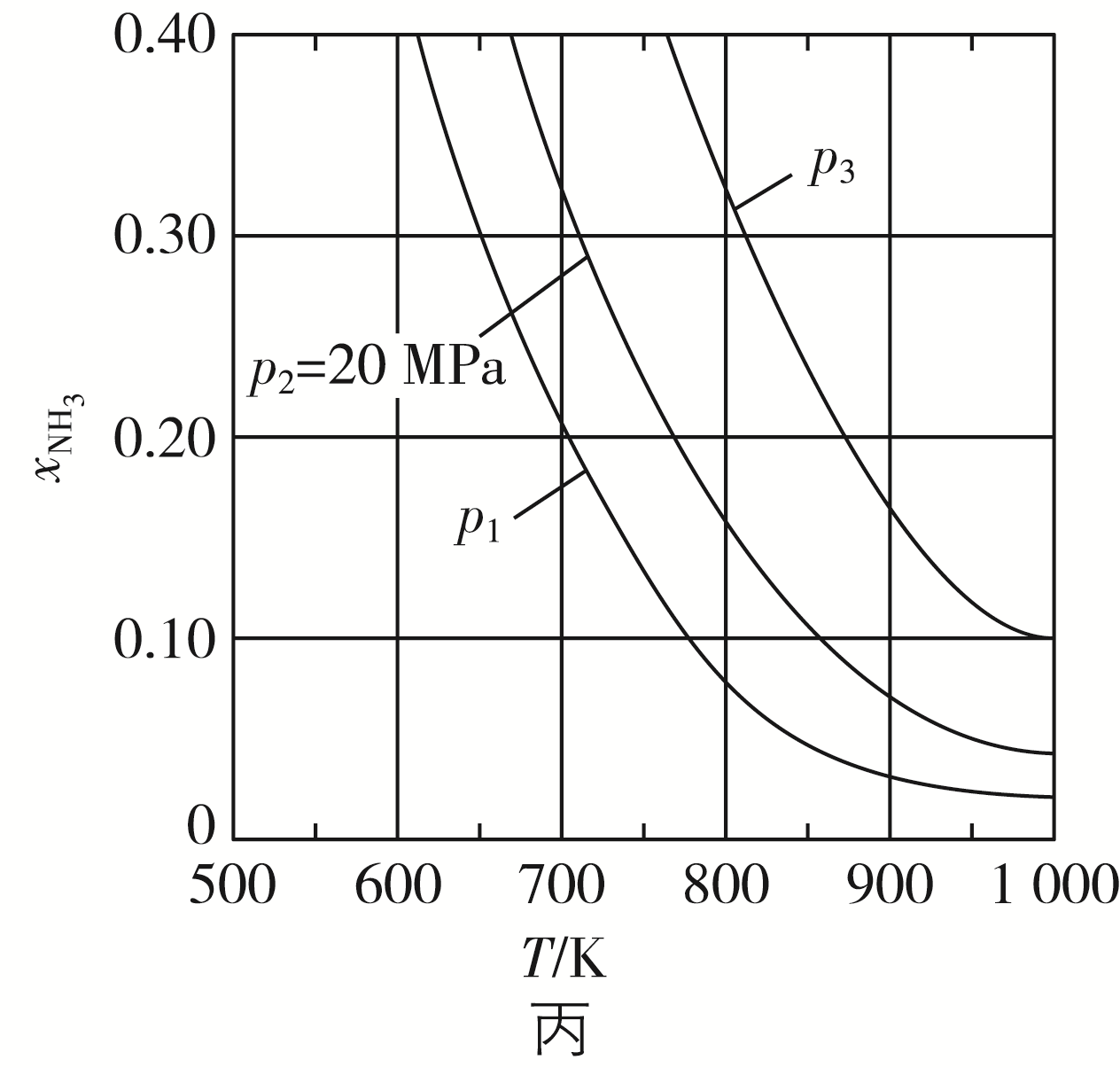
角度2　单反应体系平衡相关计算

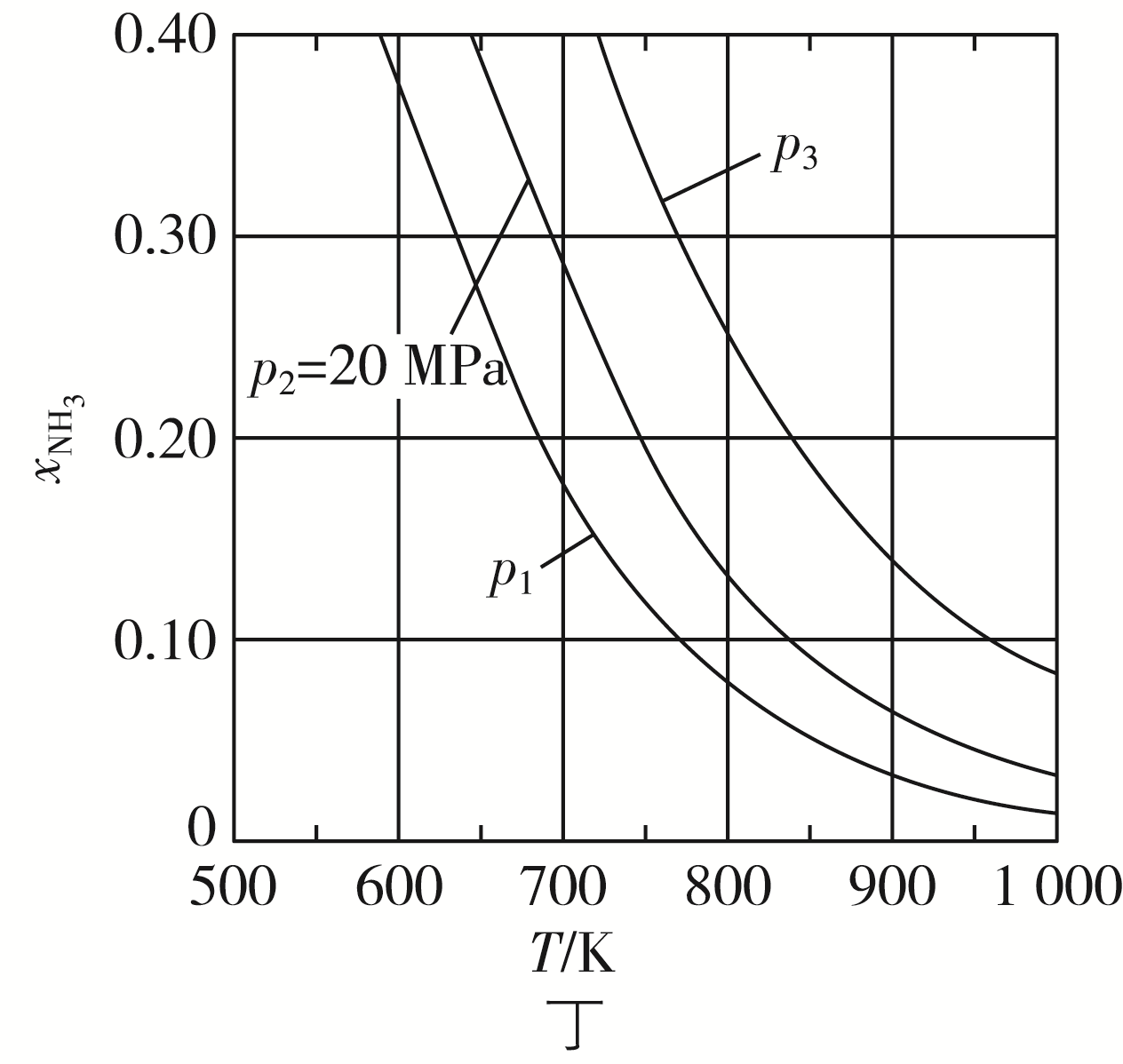
**真题例析**

**例2** [新课标2023·29节选]氨是最重要的化学品之一，我国目前氨的生产能力位居世界首位。回答下列问题：

已知反应：N2(g)＋H2(g)===NH3(g)。

在不同压强下，以两种不同组成进料，反应达平衡时氨的摩尔分数与温度的计算结果如图丙、丁所示。其中一种进料组成为*x*H2＝0.75、*x*N2＝0.25，另一种为*x*H2＝0.675、*x*N2＝0.225、*x*Ar＝0.10。(物质*i*的摩尔分数：*xi*＝)





①图中压强由小到大的顺序为\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_，判断的依据是\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_。

②进料组成中含有惰性气体Ar的图是\_\_\_\_\_\_\_\_。

③图丙中，当*p*2＝20 MPa、*x*NH3＝0.20时，氮气的转化率*α*＝\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_。该温度时，反应N2(g)＋H2(g)NH3(g)的平衡常数*K*p＝\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_MPa－1(化为最简式)。

**解析** ①N2(g)＋H2(g)NH3(g)的正反应是气体总物质的量减小的反应，在其他条件不变的情况下，增大压强平衡正移，平衡时NH3的摩尔分数增大，根据图像可知*p*1＜*p*2＜*p*3。

②Ar不参与反应，两种进料组成中N2与H2的物质的量之比均为1∶3，在总压强不变的情况下加入Ar相当于按比例减小了与反应有关的气体的压强，则当温度和总压强不变时，加入了Ar的体系正向进行的程度低于未加入Ar的体系，即加入了Ar的体系达到平衡时NH3的摩尔分数低于未加入Ar的体系，因此图丁表示进料组成中含有Ar的体系。

③设图丙体系的进料组成为1 mol N2和3 mol H2，达到平衡时N2转化了*x* mol，可得三段式：

　　 　 　　N2(g)＋H2(g)NH3(g)　*n*总

起始量/mol 　 1　　　3　 　 　　0　　　4

转化量/mol *x* 3*x* 2*x*

平衡量/mol 1－*x* 3－3*x* 2*x* 4－2*x*

结合题中信息可得＝0.20，解得*x*＝，即平衡时N2的转化率为33.3%。平衡时，气体总物质的量为mol＝ mol，N2、H2、NH3的物质的量分别为 mol、2 mol、 mol，即N2、H2、NH3的物质的量分数分别为0.2、0.6、0.2，因此*p*(N2)＝*p*(NH3)＝0.2×20 MPa＝4 MPa，*p*(H2)＝0.6×20 MPa＝12 MPa，压强平衡常数*K*p＝＝ MPa－1。

**答案** ①*p*1＜*p*2＜*p*3　合成氨的正反应为气体总物质的量减小的反应，增大压强平衡正移，平衡时NH3的摩尔分数增大　②丁　③33.3%(或)

**例3** [全国乙2022·28节选]H2S热分解反应为2H2S(g)===S2(g)＋2H2(g)。在1 470 K、100 kPa反应条件下，将*n*(H2S)∶*n*(Ar)＝1∶4 的混合气进行H2S热分解反应。平衡时混合气中H2S与H2的分压相等，H2S平衡转化率为\_\_\_\_，平衡常数*K*p＝\_\_\_\_\_\_\_\_kPa。

**解析** ①确定体系状态：100 kPa下发生反应→恒压体系→*p*不变的单平衡体系

②从定量角度分析：设起始*n*(H2S)＝*x* mol、*n*(Ar)＝4*x* mol，平衡时S2的物质的量为*a* mol，以物质的量关系列出三段式：

　　　　 2H2S(g) === S2(g) ＋ 2H2(g)

起始量/mol 　　*x*　　　　　0　　　　0

转化量/mol 　　2*a*　　　 　*a*　　　　2*a*

平衡量/mol　　*x*－2*a*　　 　*a*　　　　2*a*

根据题中信息，平衡时， *p*H2S＝*p*H2即*n*H2S＝*n*H2可得*x*－2*a* ＝2*a*，解得*a*＝*x*，H2S平衡转化率为×100%＝50%。即平衡时，体系内*n*(H2S)＝*x* mol、*n*(S2)＝*x* mol、*n*(H2)＝*x* mol、*n*(Ar)＝4*x* mol；*n*总＝*n*(H2S)＋*n*(S2)＋*n*(H2)＋*n*(Ar)＝*x* mol，则*K*p＝＝*p*(S2)＝×100 kPa≈4.76 kPa。

**答案** 50%　4.76

▶知识风暴

通过三段式解题时，需先明确装置状态(恒容或恒压)、各物质起始量，根据下列方法进行列式求解。单平衡体系的三段式列法示例：

向容器内充入*x* mol A、*y* mol B发生反应，*t* min内达到平衡状态，可根据物质的量关系列出三段式并求出下列物理量。

*a*A(g) ＋*b*B(g)*c*C(g) ＋*d*D(g)

起始量/mol　　*x*　　　　*y*　　　　0　 　　0

转化量/mol　　*a*　　　　*b*　　　　*c*　　 　*d*

平衡量/mol　 *x*－*a*　 　*y*－*b*　　　*c*　　　 *d*

(1)反应速率：*v*＝＝

(2)转化率：*α*＝×100%

(3)物质的量分数/体积分数：*φ*＝×100%

(4)总压与分压的关系：分压： *p*＝*p*总×*φ*

总压：*p*总＝*p*1＋*p*2＋*p*3＋……

(5)浓度平衡常数： *K*c＝

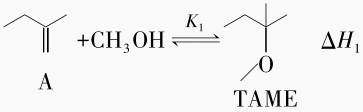
(6)浓度商：*Q*＝

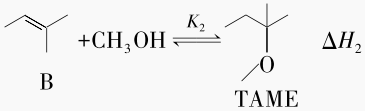
(7)压强平衡常数： *K*p＝

角度3　多反应平衡体系中的相关计算

**真题例析**

**例4** [山东2021·20节选]2－甲氧基－2－甲基丁烷(TAME)常用作汽油添加剂，在催化剂作用下，可通过甲醇与烯烃的液相反应制得，体系中同时存在如下反应：

反应Ⅰ：

反应Ⅱ：

反应Ⅲ：

为研究上述反应体系的平衡关系，向某反应容器中加入1.0 mol TAME，控制温度为353 K，测得TAME的平衡转化率为*α*。已知反应Ⅲ的平衡常数*Kx*3＝9.0，则平衡体系中B的物质的量为\_\_\_\_ mol，反应 Ⅰ 的平衡常数*Kx*1＝\_\_\_\_\_\_\_\_。同温同压下，再向该容器中注入惰性溶剂四氢呋喃稀释，反应Ⅰ的化学平衡将\_\_\_\_\_\_\_\_(填“正向移动”“逆向移动”或“不移动”)；平衡时，A与CH3OH物质的量浓度之比*c*(A) ∶*c*(CH3OH)＝\_\_\_\_\_\_\_\_。

**解析** ①确定体系状态：根据题中表述，体系内分别发生反应：TAME→A＋CH3OH、TAME →B＋CH3OH，即多平衡体系(竞争反应)

②从定量角度分析：设平衡时A的物质的量为*x* mol，B的物质的量为*y* mol，根据物质的量关系可分别列式：

　　　　　　 　TAME→ A ＋ CH3OH

转化物质的量/mol　　*x*　　 *x*　　　*x*

　　　　　　　 TAME→ B ＋ CH3OH

转化物质的量/mol　　*y*　　 *y*　　　*y*

平衡时，体系中含*n*(TAME)＝(1－*x*－*y*)mol、*n*(A)＝*x* mol、*n*(B)＝*y* mol、*n*(CH3OH)＝(*x*＋*y*)mol，*n*总＝ *n*(TAME)＋*n*(A)＋*n*(B)＋*n*(CH3OH)＝(1＋*x*＋*y*)mol。TAME的平衡转化率为*α*，即＝*α*，*Kx*3＝9.0，即＝9，解得⇒平衡体系中，*n*(B)＝*y* mol＝0.9*α* mol，*Kx*1＝＝＝；

加入四氢呋喃稀释后，平衡逆向移动；

设加入四氢呋喃后，TAME的转化率为*β*，溶液体积为*V*，依上述思路可得*c*(A)∶*c*(CH3OH)＝∶＝1∶10。

**答案** 0.9*α*　逆向移动　1∶10

▶知识风暴

