

Teplota varu roztoku	Teplota mrznutí rozpouštědla z roztoku
(1)=rozpuštědlo (2)=rozpuštěná netěkavá látka	(1)=rozpuštědlo, (2)=rozpuštěná látka (1) a (2) se v pevné fázi nemísí
$\ln x_1 = -\frac{\Delta_{\text{vyp},1} H_m}{R} \left( \frac{1}{T_{\text{varu},1}} - \frac{1}{T} \right)$	$\ln x_1 = \frac{\Delta_{\text{tani},1} H_m}{R} \left( \frac{1}{T_{\text{tani},1}} - \frac{1}{T} \right)$
Linearizovaný vztah ( <b>ebulioskopie</b> ):	Linearizovaný vztah ( <b>kryoskopie</b> ):
$\Delta T = T - T_{\text{varu},1} = K_E m_2$	$\Delta T = \Delta T - T_{\text{tani},1} = -K_K m_2$
ebulioskopická konstanta: $K_E = \frac{RT_{1,\text{varu}}^2 M_1}{\Delta H_{\text{vyp},1}}$	kryoskopická konstanta: $K_K = \frac{RT_{1,\text{tani}}^2 M_1}{\Delta H_{\text{tani},1}}$

### 1. Chladicí směs

Odhadněte bod tání směsi 60 hm.% vody a 40 hm.% ethylenglykolu.

- Pomocí kryoskopické konstanty vody,  $K_K = 1.86 \text{ K kg mol}^{-1}$ .
- Za předpokladu, že směs je ideální a entalpie tání vody je  $6.01 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

$$KK=1.86 [\text{K} \cdot \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}] = 1.86 \text{ kg K mol}^{-1}$$

$$mm=40 [\text{g}] / M(\text{C}_2\text{O}_2\text{H}_6) / 60 [\text{g}] = 10.74 \text{ mol} / \text{kg}$$

$$T=(0\text{oC})-KK*mm = 253.2 \text{ K a)}$$

$$DH=6.01 [\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}] = 6010 \text{ J mol}^{-1}$$

$$xvoda=60 [\text{g}] / M(\text{H}_2\text{O}) / (40 [\text{g}] / M(\text{C}_2\text{O}_2\text{H}_6) + 60 [\text{g}] / M(\text{H}_2\text{O})) = 0.8379$$

$$T=1/(1/(0\text{oC})-R*\ln(xvoda)/DH) = 256 \text{ K b)}$$

$$to \text{ g} = \text{unit set}$$

$$0.21 - (9 \text{ } 0.02 - (e$$

### 2. Kryoskopie

Kryoskopická konstanta kafru je  $K_K = 39 \text{ K kg mol}^{-1}$ . Po přidání

$m=0.121 [\text{g}] = 0.121 \text{ g}$  neznámé organické látky k 10 g kafru klesla teplota tání ze  $176 \text{ }^\circ\text{C}$  na  $172.3 \text{ }^\circ\text{C}$ . Vypočtěte molární hmotnost neznámé látky.

$$(u\text{e}t\text{a}l\text{e}n : \text{r}\text{a}f\text{e}n) \text{ mol/g } 128$$

$$KK=39 [\text{K} \cdot \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}] = 39 \text{ kg K mol}^{-1}$$

$$mkafr=10 [\text{g}] = 10 \text{ g}$$

$$DT=(176 \text{ oC})-(172.3 \text{ oC}) = 3.7 \text{ K}$$

$$M=KK*m/mkafr/DT = 127.5 \text{ g mol}^{-1} \text{ např. naftalen}$$

### 3. Extrakce fenolu z vody butylacetátem

Fenol se z odpadních vod extrahuje butylacetátem. Rozdělovací konstanta fenolu mezi butylacetát a vodu má při teplotě  $30 \text{ }^\circ\text{C}$  hodnotu

$$K_N = \frac{c_w(\text{fenol v butylacetátu})}{c_w(\text{fenol ve vodě})} = 55,$$

kde  $c_w$  je hmotnostní koncentrace. Jestliže  $1 \text{ m}^3$  odpadní vody obsahuje 20 kg fenolu, vypočtěte:

- Množství butylacetátu, které musíme použít k extrakci, má-li se snížit obsah fenolu na 0.1 % původní hodnoty jednorázovou extrakcí.
- Kolikrát je nutno provést extrakci s použitím 100 L butylacetátu, chceme-li rovněž snížit obsah fenolu na 0.1 % původní hodnoty.
- Jak voní butylacetát?

(a) 1802 m<sup>3</sup> (b) 1802 m<sup>3</sup> (c) 1802 m<sup>3</sup> a další ovoce

```

to kg = unit set
KN=55 = 55
mF=20 [kg] = 20 kg
VV=1 [m3] = 1 m3
mV=mF/1000 = 0.02 kg 0.1%
VB=(mF-mV)/KN*VV/mV = 18.16 m3 a)
VB=100 [L] = 0.1 m3
mV=mF/(KN*VB/VV+1) = 3.077 kg
mV=mF/(KN*VB/VV+1)**2 = 0.4734 kg
mV=mF/(KN*VB/VV+1)**3 = 0.07283 kg
mV=mF/(KN*VB/VV+1)**4 = 0.0112 kg b): < 0.02 kg

```

#### 4. +Clausius-Clapeyron – opakování

Tlak nasycených par diethyletheru při teplotě 30 °C je 0.863 bar, při 40 °C je 1.229 bar. Vypočtete výparnou entalpii (předpokládejte, že nezávisí na teplotě) a normální teplotu varu.

27.91 kJ mol<sup>-1</sup>; 307.6 K

```

T1=30 oC = 303.1 K
p1s=0.863 [bar] = 8.63e+04 Pa
T2=40 oC = 313.1 K
p2s=1.229 [bar] = 1.229e+05 Pa
DH=R*ln(p1s/p2s)/((1/T2-1/T1) = 2.791e+04 J mol-1
to kJ.mol-1 = 27.91 kJ mol-1 výparná entalpie
T=1/(1/T1-ln(101325 [Pa]/p1s)*R/DH) = 307.6 K

```

#### 5. +Přehánění s vodní parou

Prakticky nemísitelná směs N,N-diethylanilinu a vody vře za tlaku 101.32 kPa při teplotě 99.4 °C. Tlak nasycených par vody při této teplotě je 99.2 kPa. Kolik gramů vody je třeba za daných podmínek k predestilování 100 g N,N-diethylanilinu?

31.36 g

```

pvoda=99.2 [kPa] = 9.92e+04 Pa
pDEA=101.32 [kPa]-pvoda = 2120 Pa
nDEA=100 [g]/M(C6H5NC4H10) = 0.6701 mol
n(voda):n(DEA) = p(voda):p(DEA)
nvoda=nDEA/pDEA*pvoda = 31.36 mol
mvoda=nvoda*M(H2O) = 0.5649 kg

```

### 6. Diagram titan–uran (podle: H. Okamoto, DOI: 10.1007/s11669-012-0127-8)

- a) Jaký je bod tání uranu?
- b) Jak vypadá směs obsahující 70 mol.% uranu za teploty 1400 °C?
- c) Jak byste charakterizovali fázi stabilní za teploty 1000 °C?
- d) Kolik je na diagramu eutektoidů? Mezi jakými fázemi?

The Ti-U phase diagram in [Massalski2] was redrawn from [1987Mur] who critically assessed experimental phase boundary data and proposed a phase diagram by thermodynamic modeling.

Figure 1 shows the Ti-U phase diagram calculated by [2011Ber]. In addition to the experimental data used in the [1987Mur] has been modified in Table 1 to reflect the changes made in Fig. 1.

#### References

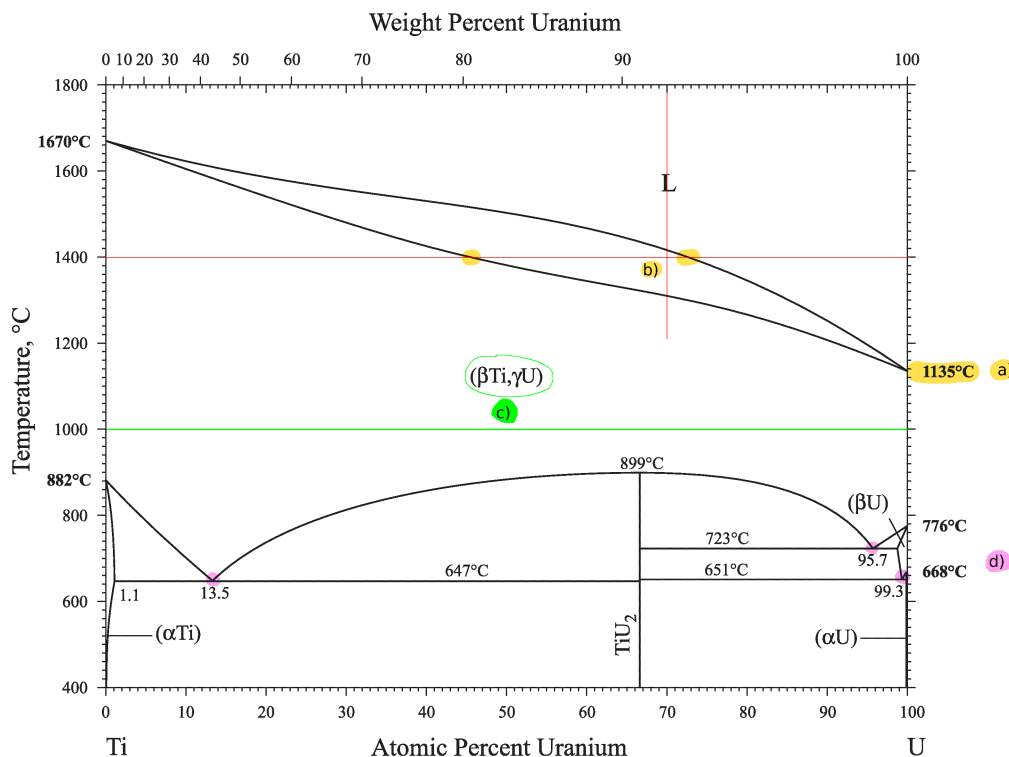
**1971Lin:** M. Linard, Study of Uranium-Titanium Alloys with Low Titanium Contents (0 to 1.5 wt. Percent), Report CEA-R-4180, 1971, 114 pp, in French

assessment of [1987Mur], the data of [1971Lin] were taken into account in their work. The main difference of this phase diagram from that of [1987Mur] is found in the (βU) and (αU) phase area: According to [1987Mur], the maximum solubility of Ti in (αU) is about 2 at.% in contrast to 0 at.% in Fig. 1. Ti-U crystal structure table in **1987Mur:** J.L. Murray, *Phase Diagrams of Binary Titanium Alloys*, J.L. Murray, ed., ASM International, Metals Park, OH, 1987, p 313-318

**2011Ber:** A. Berche, N. Dupin, C. Guéneau, C. Rado, B. Sundman, and J.C. Dumas, Calphad Thermodynamic Description of Some Binary Systems Involving U, *J. Nucl. Mater.*, 2011, **411**, p 131-143

**Table 1 Ti-U crystal structure data**

Phase	Composition, at.% U	Pearson symbol	Space group	Strukturbericht designation	Prototype
(βTi, γU)	0 to 100	<i>cI2</i>	<i>Im</i> $\bar{3}m$	<i>A2</i>	W
(αTi)	0 to 1.1	<i>hP2</i>	<i>P6</i> $_3/mmc$	<i>A3</i>	Mg
TiU <sub>2</sub>	66.7	<i>hP3</i>	<i>P6/mmm</i>	<i>C32</i>	AlB <sub>2</sub>
(βU)	98.7 to 100	<i>tP30</i>	<i>P4</i> $_2/mnm$	<i>A<sub>b</sub></i>	βU
(αU)	100	<i>oC4</i>	<i>Cmcm</i>	<i>A20</i>	αU

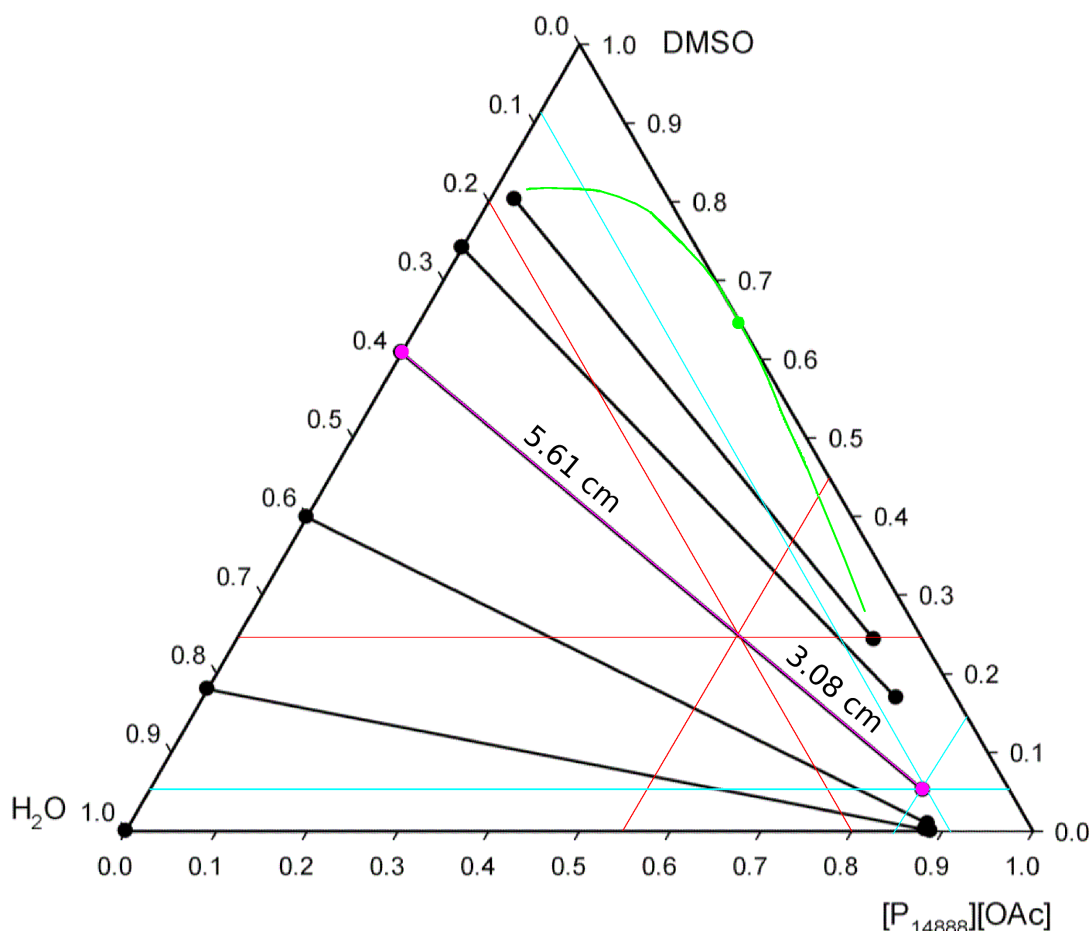


**Fig. 1** Ti-U phase diagram

a) 1135 °C;  
 b) směs tvořící a pevné fáze (βTi, γU);  
 c) směsův krystal (βTi, γU), což je bc mřížka (cI2);  
 d) 3: αTi + TiU<sub>2</sub>, βU, TiU<sub>2</sub>, αU + αU

### 7. Ternární diagram

Voda, dimethylsulfoxid a trioctyl(tetradecyl)phosphonium acetát (iontová kapalina, IL) má následující ternární diagram. Na stranách jsou hmotnostní %.<sup>1</sup>



**Figure 53:** Ternary Phase Diagram,  $[P_{14888}][OAc]$ , DMSO and Water

- Smícháme 4 g vody, 11 g IL a 5 g DMSO. Určete složení fází v rovnováze.
- Jaké budou hmotnosti fází?
- Odhadněte polohu kritického bodu.

a) fáze 1: 40% vody, 60% DMSO, stopy IL, fáze 2: 9% vody, 6% DMSO, 85% IL;  
 b) 7.1 g fáze 1, 12.9 g fáze 2;  
 c) možná nebude, pokud ano, pak nepatrně vody, ~ 65% DMSO a ~ 35% IL

<sup>1</sup>Ionic liquids and electrolytes for cellulose dissolution (PhD dissertation). Ashley John Holding. Helsinki 2016