

! 1. (g): výpočet K za [V] =====

! S02Cl2 -&gt; S02 + Cl2

! protože pro [V] je n úměrné p, je výhodné

! bilanci provést v parc. tlacích:

! =====

! zač. rovn.

! -----

! S02Cl2 p0 p0-dp

! S02 0 dp

! Cl2 0 dp

! -----

! p p0 p0+dp (celkový tlak)

! =====

V=2.5e-3 ! [m<sup>3</sup>]

0.0025

n0=15/135 ! [mol] poč. množství S02Cl2

0.11111

T=400 ! [K]

400

p0=n0\*R\*T/V ! [Pa] počáteční tlak

1.4781 · 10<sup>+05</sup>

p=255e3 ! [Pa] tlak v rovnováze

2.55 · 10<sup>+05</sup>

! rovnice pro dp: p=p0+dp

dp=p-p0

1.0719 · 10<sup>+05</sup>K=(dp/pst)<sup>2</sup>/((p0-dp)/pst)

2.7911

! alternativní postup - bilance v látk. množství

! =====

! zač. rovn.

! -----

! S02Cl2 n0 n0-x

! S02 0 x

! Cl2 0 x

! -----

! n(g) n0 n0+x

! =====

ng=p\*V/R/T ! látkové množství plynu v rovnováze

0.19168

! rovnice pro x je n0+x=ng, =&gt;

x=ng-n0

0.080573

K=(x/ng\*p/pst)<sup>2</sup>/((n0-x)/ng\*p/pst)

2.7911

! 2. (g)+(s): parciální tlak =====

! 2 Cu(s) + (1/2) O2 -&gt; Cu2O (s)

DG=-82.19e3 ! [J/mol]

-82190

T=1200 ! [K]

1200

K=exp(-DG/R/T)

3780.6

! K=aCu2O/(aCu<sup>2</sup>\*aO2<sup>0.5</sup>)

! aCu2O=1, aCu=1 (čisté látky ve st. stavu)

! K=1/aO2<sup>0.5</sup> =>aO2=1/K<sup>2</sup>6.9964 · 10<sup>-08</sup>

! aO2=pO2/pst =&gt;

pO2=aO2\*pst

0.0070891

! 3. Vodní plyn =====

! C(s) + H2O -&gt; CO + H2

T=900 ! [K]

900

p=100e3 ! [Pa], =pst

1 · 10<sup>+05</sup>V=100 ! [m<sup>3</sup>]

100

n=p\*V/R/T ! [mol], vstupní množství vodní páry

1336.4

K=0.2

0.2

! =====

! zač. rovn.

! -----

! C n n-x nepřispívá do n(g)

! H2O n n-x

! CO 0 x

! H2 0 x

! -----

! n(g) n n-x

! =====

! rovnovážná podmínka (pozn.: p=pst):

! K = (x/(n+x))<sup>2</sup> / ((n-x)/(n+x))solve x=0,n K - (x/(n+x))<sup>2</sup> / ((n-x)/(n+x))

545.57

! podle bilance ubylo x uhlíku

m=x\*12 ! [g] uhlíku

6546.8

! 4. Opakování - syntéza methanolu =====

! CO + 2 H2 -> CH3OH

!=====

! zač. rovn.

!-----

! CO 1 1-x

! H2 2 2-2\*x

! CH3OH 0 x

!-----

! n(g) 3 3-2\*x

!=====

! Podmínka pro x:

! 0.0108 = x/(3-2\*x)

solve x=0,1 0.0108 - x/(3-2\*x) ! [mol]

**0.031715**

p=10e6 ! [Pa]

**1 · 10<sup>+07</sup>**

pst ! =101325 Pa

**1.0132 · 10<sup>+05</sup>**

ng=3-2\*x ! [mol]

**2.9366**

K = x/ng\*p/pst / ((1-x)/ng\*p/pst \* ((2-2\*x)/ng\*p/pst  
 )↑2)

**7.7323 · 10<sup>-06</sup>**