

```

! 1. Závislost K na teplotě =====
K1=26.85
                                26.85
T1=600      ! [K]
                                600
T2=400      ! [K]
                                400
DrHm=-39.8e3 ! [J mol-1]
                                -39800
K2=K1*exp(DrHm/R*(1/T1-1/T2))
                                1450

! 2. Závislost K na teplotě =====
! n-butan -> i-butan
! a_i-butan=y_i-butan*p/pst
! a_butan=y_butan*p/pst
! K=a_i-butan/a_butan=y_i-butan/y_butan
T1=298      ! [K]
                                298
K1=82/(100-82)
                                4.5556
T2=400      ! [K]
                                400
K2=65.7/(100-65.7)
                                1.9155
DrHm=R*ln(K2/K1)/(1/T1-1/T2)    ! [J mol-1]
                                -8418.3
! Hess: DrHm = Dsl(i-butan) - Dsl(n-butan)
Dsl_i_butan=126.15e3-DrHm      ! [J mol-1]
                                1.3457 · 10+05

! 3. Rozklad vápence =====
! CaCO3 (s) -> CaO (s) + CO2 (g)
K1=1.4e-23
                                1.4 · 10-23
T1=298
                                298
p=97e3      ! [Pa]
                                97000
DrHm=176e3  ! [J mol-1]
                                1.76 · 10+05
! rovnovážná konstanta (při neznámé teplotě T2):
K2=p/pst
                                0.95732
! rovnice pro T2:
! K2=K1*exp(DrHm/R*(1/T1-1/T2))
solve T2=500,2000 K2-K1*exp(DrHm/R*(1/T1-1/T2))
                                1147.1
! nebo analyticky:
! R/DrHm*ln(K2/K1)=1/T1-1/T2
T2=1/(1/T1-R/DrHm*ln(K2/K1))
                                1147.1

! 4. Závislost K na teplotě zadaná vzorcem =====
def lnK=ln 10*(6366/T-2.961*log T + 7.668e-4*T -
1.764e-7*T↑2 - 0.43)
dlnKT=deriv T=600 lnK          ! [K-1]
                                -0.044374
DH=dlnKT*R*T↑2                 ! [J mol-1]
                                -1.3282 · 10+05

! 5. Závislost K na teplotě =====
! C4H8 + H2O -> C4H9OH
! =====
! zač. rovn.
!-----
! C4H8      1  1-x
! H2O       4  4-x
! C4H9OH    0  x
!-----
! n(g)      5  5-x
! =====
! rovnice pro x: x_C4H9OH=x/(5-x)
! rovnovážná podmínka (pozn.: p=pst):
! K = x/(5-x)/((1-x)/(5-x)*(4-x)/(5-x))
T1=400
                                400
solve x 0.0135-x/(5-x)
                                0.066601
K1=x/(5-x)/((1-x)/(5-x)*(4-x)/(5-x))
                                0.089493
T2=450
                                450
solve x 0.0026-x/(5-x)
                                0.012966
K2=x/(5-x)/((1-x)/(5-x)*(4-x)/(5-x))
                                0.016431
DH=R*ln(K2/K1)/(1/T1-1/T2)
                                -50734

! 6. Směr reakce =====
! n-butan -> i-butan
! a_i-butan=y_i-butan*p/pst
! a_butan=y_butan*p/pst
! K=a_i-butan/a_butan=y_i-butan/y_butan
! a) nejjednodušší je použití K.sl:
K=10↑(-12.329+12.078)
                                0.56105
T=800
                                800
DGstd=-ln(K)*R*T
                                3844.3
DG=DGstd+R*T*ln(40/60)
                                1147.3
! >0 ==> doleva
! b) ekvivalentní výpočet z Psi=(G-H298)/T
! DrG = (sum_i nu_i Psi_i)*T + DrH
DGstd=(-342.209-(-357.481))*T+(-134516-(-126148))
                                3849.6
DG=DGstd+R*T*ln(40/60)
                                1152.6

```