

```
! 1. (g): výpočet K =====
! CH4 + NH3 -> HCN + 3 H2
!=====
!      zač. rovn.
!-----
! CH4   37  37-x
! NH3   63  63-x
! HCN    0   x
! H2     0  3*x
!-----
! n(g)  100 100+2*x
!=====
```

p=pst ! [Pa] 1.0132 · 10⁺⁰⁵

xHCN=0.066 ! zadání 0.066

```
! rovnice pro x:
! xHCN=x/(100+2*x)
solve x=0,100 xHCN-x/(100+2*x)
7.6037
```

```
! nebo analyticky:
! xHCN*(100+2*x)=x
x=xHCN*100/(1-2*xHCN)
7.6037
```

```
! aktivity:
aCH4=(37-x)/(100+2*x)*p/pst
0.25516
```

```
aNH3=(63-x)/(100+2*x)*p/pst
0.48084
```

```
aHCN=x/(100+2*x)*p/pst
0.066
```

```
aH2=3*x/(100+2*x)*p/pst
0.198
```

K=aH2³*aHCN/(aCH4*aNH3) 0.0041757

```
! 2. (g): výpočet složení =====
! S02 + (1/2) O2 -> S03
!=====
!      zač. rovn.
!-----
! S02   1   1-x
! O2    1   1-x/2 ! na zač. 2*1/2
! N2    4   4
! S03   0   x
!-----
! n(g)  6   6-x/2 ! součet přes všechny plyny
!=====
```

K=1.79 1.79

p=130e3 ! [Pa] 1.3 · 10⁺⁰⁵

```
! aktivity:
def aS02=(1-x)/(6-x/2)*p/pst
def aO2=(1-x/2)/(6-x/2)*p/pst
```

```
def aS03=x/(6-x/2)*p/pst
! def aN2=4/(6-x/2)*p/pst (nepotřebuju)
```

```
! rovnice pro x:
! aS03/(aS02*aO20.5)=K
solve x=0,1 aS03/(aS02*aO20.5)-K
0.4277
```

```
molprocS02=(1-x)/(6-x/2)*100
9.8908
```

```
molprocO2=(1-x/2)/(6-x/2)*100
13.587
```

```
molprocS03=x/(6-x/2)*100
7.3919
```

```
molprocN2=4/(6-x/2)*100
69.131
```

```
undef aS03
undef aO2
undef aS02
```

```
! 3. Hess =====
logK=10.478*2-20.676
0.28
```

```
K=10logK
1.9055
```

```
! 4. výpočet složení, stupeň přeměny =====
! C7H8 + 3 H2 -> C7H14
```

```
!=====
!      zač. rovn.
!-----
```

```
! C7H8   1   1-x
! H2     n   n-3*x
! C7H14  0   x
```

```
!-----
! n(g)   1+n 1+n-3*x
```

```
!=====
```

K=0.644 0.644

```
! klíčová složka=C7H8
! stupeň přeměny=x=0.25
x=0.25
0.25
```

p=pst 1.0132 · 10⁺⁰⁵

```
! aktivity
def aC7H8=(1-x)/(1+n-3*x)*p/pst
def aH2=(n-3*x)/(1+n-3*x)*p/pst
def aC7H14=x/(1+n-3*x)*p/pst
```

```
! hledáme n
! rovnice: aC7H14/(aC7H8*aH23)=K
solve n=3,100 aC7H14/(aC7H8*aH23)-K
4.8237
```

```
undef aC7H8
undef aH2
undef aC7H14
```

```

! 5. Vliv tlaku na rozsah reakce =====
! C6H6 + C3H6 -> C6H5-C3H6 (ipb)
!=====
!      zač. rovn.
!-----
! C6H6   1   1-x
! C3H6   1   1-x
! ipb    0   x
!-----
! n(g)   2   2-x
!=====

```

x=0.23 ! stupeň přeměny zde = rozsah reakce **0.23**

ng=2-x **1.77**

p=pst ! [Pa] **1.0132 · 10⁺⁰⁵**

K = x/ng/((1-x)/ng)² **0.68663**

x=x*3 ! trojnásobek dle zadání **0.69**

ng=2-x ! nutno přepočítat **1.31**

! rovnovážná podmínka:

! K=x/ng*p/pst/((1-x)/ng*p/pst)²

! hledáme p:

p=pst/K*x/ng/((1-x)/ng)² **1.388 · 10⁺⁰⁶**