

$$R=8.314 = 8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

Tlak par nad ideálním roztokem – Raoultův zákon (x_i = složení kapalné fáze, y_i = složení parní fáze)

$$p_i = p y_i = x_i p_i^s \quad \Rightarrow \quad p = \sum_i x_i p_i^s$$

1. Výpočet tlaku a složení parní fáze

Na základě dále uvedených teplotních závislostí tlaků nasycených par benzenu (1) a toluenu (2) a za předpokladu platnosti Raoultova zákona vypočítejte tlak par a složení parní fáze nad roztokem obsahujícím 60 mol.% benzenu, který vře při teplotě 90 °C.

Data [kPa, °C]:

$$\ln p_1^s = 13,88581 - 2788,5/(t + 220,8),$$

$$\ln p_2^s = 13,99562 - 3094,5/(t + 219,4).$$

$$p^d = 103,4 \text{ kPa}, y_1^d = 0,790$$

$$\text{def } p1s = \exp(13.88581 - 2788.5/(t+220.8)) = (\text{defined}) \text{ kPa}$$

$$\text{def } p2s = \exp(13.99562 - 3094.5/(t+219.4)) = (\text{defined}) \text{ kPa}$$

$$t=90 = 90 \text{ °C}$$

$$x1=0.6 = 0.6$$

$$x2=1-x1 = 0.4$$

$$p1s = 136.2 \text{ kPa}$$

$$p2s = 54.27 \text{ kPa}$$

$$p=x1*p1s+x2*p2s = 103.4 \text{ kPa}$$

$$y1=x1*p1s/p = 0.7901$$

$$y2=x2*p2s/p = 0.2099$$

2. Výpočet tlaku a složení kapalné fáze

Na základě dat z příkladu 1 vypočítejte rosný tlak a složení rovnovážné kapalné fáze u směsi, která začne kondenzovat při teplotě 90 °C, je-li složení plynné fáze 60 % benzenu (1) a 40 % toluenu (2).

$$x_1 = 0.6, y_1 = 0.6$$

$$y1=0.6 = 0.6$$

$$y2=1-y1 = 0.4$$

$$\text{rovnice } y1=x1*p1/(x1*p1+(1-x1)*p2s) \text{ nebo } y1:y2=[x1*p1s]:[(1-x1)*p2s] \Rightarrow$$

$$x1=y1*p2s/(y2*p1s+y1*p2s) = 0.3742$$

3. Výpočet složení obou fází

Na základě dat z příkladu 1 vypočítejte složení kapalné a parní fáze, které jsou v rovnováze při teplotě 90 °C a tlaku 100 kPa.

$$p = 100 \text{ kPa}, t = 90 \text{ °C}$$

$$\text{rovnice } p=x1*p1s+(1-x1)*p2s$$

$$p=100 = 100 \text{ kPa}$$

$$x1=(p-p2s)/(p1s-p2s) = 0.5584$$

$$y1=x1*p1s/p = 0.7604$$

4. *Výpočet teploty a složení parní fáze

Na základě dat z příkladu 1 vypočítejte teplotu a složení parní fáze odpovídající varu kapalné směsi, která obsahuje 60 mol.% benzenu (1) a 40 mol.% toluenu (2) za tlaku 100 kPa.

$$p = 100 \text{ kPa}$$

rovnice $x1*p1s+(1-x1)*p2s=p$, kde ale $p1s$ a $p2s$ jsou složitými funkcemi t

$$x1=0.6 = 0.6$$

$$x2=1-x1 = 0.4$$

$$\text{solve } t=90 \text{ } x1*p1s+(1-x1)*p2s-p = 88.87 \text{ °C}$$

undef p1s = (undefined) kPa

undef p2s = (undefined) kPa

Tlak par nad směsí nemísitelných kapalin

$$p_i = p_i^s \quad \Rightarrow \quad p = \sum_i p_i^s$$

5. Přehánění s vodní parou – výpočet složení destilátu

Nemísitelné kapaliny voda (1) a chlorbenzen (2) destilovaly za teploty 90,3 °C. Při této teplotě jsou tlaky nasycených par čisté vody 70 kPa a čistého chlorbenzenu 28 kPa. Určete molární a hmotnostní zlomek chlorbenzenu v páře a atmosférický tlak v době, kdy probíhal experiment. $M(\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}) = 112,5 \text{ g mol}^{-1}$.

$$p = 98 \text{ kPa}, \quad y_2 = 0,286, \quad w_2 = 0,714$$

$$p_1 = 70 = \mathbf{70} \text{ kPa}$$

$$p_2 = 28 = \mathbf{28} \text{ kPa}$$

$$p = p_1 + p_2 = \mathbf{98} \text{ kPa}$$

$$y_2 = p_2 / p = \mathbf{0.2857}$$

$$y_1 = 1 - y_2 = \mathbf{0.7143}$$

$$w_2 = y_1 \cdot M(\text{H}_2\text{O}) / (y_1 \cdot M(\text{H}_2\text{O}) + y_2 \cdot M(\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl})) = \mathbf{0.2858}$$

Henryho zákon; (1)=rozpouštědlo, (2)=rozpuštěný plyn: $p_2 = K_H x_2$ nebo $c_2 = k_{h[c]}^\circ p_2$ nebo $m_2 = k_{h[m]}^\circ p_2$

6. Henryho zákon

Kolik litrů O_2 , N_2 a CO_2 je rozpuštěno v dobře vzduchovaném stolitrovém akváriu za teploty $0^\circ C$? Ve vzduchu je 21 % O_2 , 78 % N_2 a 400 ppm CO_2 . Henryho konstanty pro složení vyjádřené molárním zlomkem: $K_H(O_2) = 4,40 \text{ GPa}$, $K_H(N_2) = 8,68 \text{ GPa}$, $K_H(CO_2) = 167 \text{ MPa}$.



ε'υρ 620'0 'ε'υρ εΓ'Ι 'ε'υρ 09'0

$$n_1 = 100 \cdot 1000 / M(H_2O) = 5551 \text{ mol}$$

$$T = 273 = 273 \text{ K}$$

$$p_{st} = 101325 = 1.013e+05 \text{ Pa}$$

O_2 :

$$K_H = 4.4e9 = 4.4e+09 \text{ Pa}$$

$$p = 0.21 \cdot p_{st} = 2.128e+04 \text{ Pa}$$

$$x = p / K_H = 4.836e-06$$

$$n = x \cdot n_1 = 0.02684 \text{ mol}$$

$$V = n \cdot R \cdot T / p_{st} = 0.0006013 \text{ m}^3$$

$$V \cdot 1000 = 0.6013 \text{ dm}^3$$

N_2 :

$$K_H = 8.69e9 = 8.69e+09 \text{ Pa}$$

$$p = 0.78 \cdot p_{st} = 7.903e+04 \text{ Pa}$$

$$x = p / K_H = 9.095e-06$$

$$n = x \cdot n_1 = 0.05048$$

$$V = n \cdot R \cdot T / p_{st} = 0.001131 \text{ m}^3$$

$$V \cdot 1000 = 1.131 \text{ dm}^3$$

CO_2 :

$$K_H = 167e6 = 1.67e+08 \text{ Pa}$$

$$p = 400e-6 \cdot p_{st} = 40.53 \text{ Pa}$$

$$x = p / K_H = 2.427e-07$$

$$n = x \cdot n_1 = 0.001347$$

$$V = n \cdot R \cdot T / p_{st} = 3.018e-05 \text{ m}^3$$

$$V \cdot 1000 = 0.03018 \text{ dm}^3$$

7. Henryho konstanta

Plynná směs obsahující 10 mol.% chloru (zbytek je dusík) byla za teploty $25^\circ C$ a tlaku 100 kPa probublávána ethylbenzenem. V 1 dm^3 ethylbenzenu bylo zjištěno 0,166 mol Cl_2 . Určete Henryho konstantu chloru:

- $k_{h[c]}^\circ$ (v $\text{mol dm}^{-3} \text{ kPa}^{-1}$ pro složení dané látkovou koncentrací),
- $k_{h[m]}^\circ$ (v $\text{mol kg}^{-1} \text{ bar}^{-1}$ pro složení dané molalitou),
- K_H (v kPa pro složení vyjádřené molárním zlomkem).

a jeho rozpustnost (v g dm^{-3}) při téže teplotě za parciálního tlaku chloru 3,7 kPa. Hustota ethylbenzenu je $0,863 \text{ g cm}^{-3}$.

$$k_{h[c]}^\circ = 0.0166 \text{ mol dm}^{-3} \text{ kPa}^{-1}; k_{h[m]}^\circ = 1.92 \text{ mol kg}^{-1} \text{ bar}^{-1}; K_H = 500 \text{ kPa}; \rho = 0.863 \text{ g cm}^{-3}$$

$$n_2 = 0.166 = 0.166 \text{ mol}$$

$$V = 1 = 1 \text{ dm}^3$$

$$c = n_2 / V = 0.166 \text{ mol dm}^{-3}$$

$$p_2 = 10 = 10 \text{ kPa}$$

$$k_{hc} = c / p_2 = 0.0166 \text{ mol dm}^{-3} \text{ kPa}^{-1} \text{ — a) —}$$

$$m_1 = 0.863 = 0.863 \text{ kg}$$

$$m_m = n_2 / m_1 = 0.1924 \text{ mol kg}^{-1} \text{ molalit}$$

$$k_{hm} = m_m / p_2 = 0.01924 \text{ mol kg}^{-1} \text{ kPa}^{-1}$$

$$k_{hm} = 100 \cdot k_{hm} = 1.924 \text{ mol kg}^{-1} \text{ bar}^{-1} \text{ — b) —}$$

$$m_1=863 = \mathbf{863} \text{ g}$$

$$n_1=m_1/M(\text{C}_6\text{H}_5\text{C}_2\text{H}_5) = \mathbf{8.129} \text{ mol}$$

$$x_2=n_2/n_1 = \mathbf{0.02042} \text{ p\u0159ibli\u017en\u011b}$$

$$x_2=n_2/(n_1+n_2) = \mathbf{0.02001} \text{ p\u0159esn\u011bji}$$

$$KH=p_2/x_2 = \mathbf{499.7} \text{ kPa} \text{ --- c) ---}$$

$$p_{2x}=3.7 = \mathbf{3.7} \text{ kPa}$$

podle a) —

$$n_{2x}=k_h c \cdot p_{2x} = \mathbf{0.06142} \text{ mol}$$

$$m_{2x}=n_{2x} \cdot M(\text{C}_{12}) = \mathbf{4.355} \text{ g}$$

podle c) —

$$x_{2x}=p_{2x}/KH = \mathbf{0.007405}$$

p\u0159ibli\u017en\u011b (proto\u017ee $n_2 \ll n_1$):

$$n_{2x}=n_1 \cdot x_{2x} = \mathbf{0.06019} \text{ mol}$$

p\u0159esn\u011bji \u0159e\u0161\u00edme $x_2=n_2/(n_1+n_2)$

$$n_{2x}=n_1 \cdot x_{2x} / (1-x_{2x}) = \mathbf{0.06064} \text{ mol}$$

$$m_{2x}=n_{2x} \cdot M(\text{C}_{12}) = \mathbf{4.3} \text{ g}$$

a v\u016bbec selsk\u00fdm rozumem

$$n_{2x}=p_{2x}/p_2 \cdot n_2 = \mathbf{0.06142} \text{ mol}$$

$$m_{2x}=n_{2x} \cdot M(\text{C}_{12}) = \mathbf{4.355} \text{ g}$$

8. + Clausius-Clapeyron – opakov\u00e1n\u00ed

Tlak nasycen\u00fdch par diethyletheru p\u0159i teplot\u011b 30 °C je 0.863 bar, p\u0159i 40 °C je 1.229 bar. Vypo\u010d\u00eete v\u00fdparnou entalpii (p\u0159edpokl\u00e1dejte, \u017ee nezm\u00e9n\u00ed se s teplotou) a norm\u00e1ln\u00ed teplotu varu.

$$D_{H,298} = -34.5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$T_1=30+273 = \mathbf{303} \text{ K}$$

$$p_{1s}=0.863 = \mathbf{0.863} \text{ bar}$$

$$T_2=40+273 = \mathbf{313} \text{ K}$$

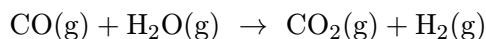
$$p_{2s}=1.229 = \mathbf{1.229} \text{ bar}$$

$$D_H=R \cdot \ln(p_{1s}/p_{2s}) / (1/T_2 - 1/T_1) = \mathbf{2.788e+04} \text{ J mol}^{-1}$$

$$T=1 / (1/T_1 - \ln(1.01325/p_{1s}) \cdot R / D_H) = \mathbf{307.5} \text{ K}$$

9. + Kirchhoffova v\u011bta – opakov\u00e1n\u00ed

Vypo\u010d\u00eete teplo, kter\u00e9 mus\u00ed vym\u011bnit reaktor s okol\u00edm za hodinu, prob\u00edh\u00e1-li v n\u011bm p\u0159i teplot\u011b 898 K za atmosférick\u00e9ho tlaku (101.3 kPa) reakce



Do reaktoru p\u0159ich\u00e1z\u00ed za uveden\u00fdch podm\u00ednek 20 m³ stechiometrick\u00e9 sm\u011b\u0159i plyn\u016f za hodinu. V\u00fdchoz\u00ed l\u00e1tky jsou p\u0159edeh\u0159\u00e1ty na teplotu 898 K a produkty odch\u00e1zej\u00ed z reaktoru se stejnou teplotou. P\u0159i v\u00fdpo\u010dtu pou\u017eijte dat uveden\u00fdch v tabulce. Uve\u010fte, zda je nutno reaguj\u00edc\u00ed sm\u011b\u0159 oh\u0159\u00edvat nebo chladit.

L\u00e1tk\u00e1	$\Delta_{sl}H^\ominus(298 \text{ K})$ kJ mol ⁻¹	$\overline{C}_{pm}^\ominus$ J K ⁻¹ mol ⁻¹
CO(g)	-110.5	30
H ₂ O(g)	-241.8	33
CO ₂ (g)	-393.5	44.5
H ₂ (g)	0	28

$$-4.82 \text{ MJ hod}^{-1} \text{ --- chladit}$$

$$T=898 = \mathbf{898} \text{ K}$$

$$D_{H,298}=-393.5e3 - (-241.8e3 - 110.5e3) = \mathbf{-4.12e+04} \text{ J mol}^{-1}$$

$$D_{Cp}=44.5+28-30-33 = \mathbf{9.5} \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$D_H=D_{H,298}+(T-298) \cdot D_{Cp} = \mathbf{-3.55e+04} \text{ J mol}^{-1}$$

$$n_{\text{plyn}}=20 \cdot 101325 / R / T = \mathbf{271.4} \text{ mol}$$

2 molekuly plynu (CO + H₂O) na 1 mol, reakčních obrátů, proto dělíme 2

$$n = n_{\text{plyn}} / 2 = 135.7 \text{ mol}$$

$$Q = n \cdot \Delta H = -4.818 \times 10^6 \text{ J hod}^{-1}$$

$$Q / 1e6 = -4.818 \text{ MJ hod}^{-1}$$

2. průběžný test: 15.11.2011, B21, 14:00

Náhradní termín (je nutno se přihlásit prostřednictvím SISu): 16.11.2011, AI, 16:00