

Bilance s chemickou reakcí – ukázka řešení

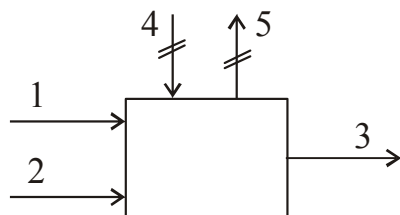
Zadání:

Vypočtete složení roztoku (v hmotn. procentech) vzniklého smícháním 1800 g roztoku kyseliny sírové ($w(\text{H}_2\text{SO}_4) = 0,12$) a 1200 g roztoku hydroxidu draselného ($w(\text{KOH}) = 0,15$).

Chemická reakce:

Proběhne neutralizační reakce podle rovnice: $\text{H}_2\text{SO}_4 + 2 \text{KOH} \rightarrow \text{K}_2\text{SO}_4 + 2 \text{H}_2\text{O}$

Bilanční schéma:



Proudy:

- ① roztok H_2SO_4
- ② roztok KOH
- ③ výsledný roztok
- ④ fikt. proud produkty
 $\text{K}_2\text{SO}_4 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- ⑤ fikt. proud reaktanty
 $\text{H}_2\text{SO}_4 + 2 \text{KOH}$

Složky:

	(M_r)
A... H_2SO_4	(98,1)
B... KOH	(56,1)
C... K_2SO_4	(174,3)
D... H_2O	(18,0)

Volba bilancované veličiny:

Údaje o složení i o množství jsou zadány ve formě hmotnostní, požadovány jsou údaje hmotnostní, výhodné je tedy použít hmotnostní bilanci.

Matice zadání:

	①	②	③	④	⑤
m_i / kg	1800	1200			
w_{Ai}	0,12	0		0	0,466
w_{Bi}	0	0,15		0	0,534
w_{Ci}	0	0		0,829	0
w_{Di}	0,88	0,85		0,171	0

- slož. fikt. proudů ④ a ⑤ ze stechiometrie:

$$w_{C4} = \frac{1 \cdot M_C}{1 \cdot M_C + 2 \cdot M_D} \cong \frac{174,3}{174,3 + 2 \cdot 18,0} =$$

$$0,829 ; w_{D4} = 1 - w_{C4} = 0,171$$

$$w_{A5} = \frac{1 \cdot M_A}{1 \cdot M_A + 2 \cdot M_B} \cong \frac{98,1}{98,1 + 2 \cdot 56,1} =$$

$$0,466 ; w_{B5} = 1 - w_{A5} = 0,534$$

Celkem máme 7 neznámých

Pro tento bilancovaný systém lze sestavit nejvýše 4 (tolik, kolik je složek) nezávislé bilanční rovnice, dále máme dodatečný vztah pro celková množství fiktivních proudů $m_4 = m_5$, a součet hmotn. zlomků = 1 v proudě ③, celkem 6 rovnic. Jednu neznámou je nutno určit jinak, v tomto případě zjištěním, která složka je klíčová (její hmotn. zlomek ve výsledném roztoku bude roven 0, ubude tedy jedna neznámá).

Zjištění, která složka je v přebytku:

Zjistíme výchozí množství reaktantů v molech:

$$n_{A0} = m_1 \cdot w_{A1} / M_A = 1800 \cdot 0,12 / 98,1 = 2,202 \text{ mol}$$

$$n_{B0} = m_2 \cdot w_{B2} / M_B = 1200 \cdot 0,15 / 56,1 = 3,209 \text{ mol}$$

stechiometrický poměr $n_B / n_A = 2 / 1$, skutečný poměr $n_{B0} / n_{A0} = 3,209 / 2,202 = 1,457 / 1$, tj.

v přebytku je kyselina sírová, ve výsledném roztoku nebude NaOH (klíčová složka), protože kompletně zreaguje; do matice zadání doplníme

$w_{B3} = 0$, počet neznámých bude 6, máme

k dispozici stejný počet nezávislých rovnic,

úloha je tedy řešitelná.

	①	②	③	④	⑤
m_i / kg	1800	1200			
w_{Ai}	0,12	0		0	0,466
w_{Bi}	0	0,15	0	0	0,534
w_{Ci}	0	0		0,829	0
w_{Di}	0,88	0,85		0,171	0

Řešení:

Zapíšeme všechny rovnice, nejprve v obecném tvaru:

$$\begin{aligned}\text{celková bilance:} & m_1 + m_2 + m_4 = m_3 + m_5 \\ \text{bilance složky A:} & m_1 \cdot w_{A1} + m_2 \cdot w_{A2} + m_4 \cdot w_{A4} = m_3 \cdot w_{A3} + m_5 \cdot w_{A5} \\ \text{bilance složky B:} & m_1 \cdot w_{B1} + m_2 \cdot w_{B2} + m_4 \cdot w_{B4} = m_3 \cdot w_{B3} + m_5 \cdot w_{B5} \\ \text{bilance složky C:} & m_1 \cdot w_{C1} + m_2 \cdot w_{C2} + m_4 \cdot w_{C4} = m_3 \cdot w_{C3} + m_5 \cdot w_{C5} \\ \text{bilance složky D:} & m_1 \cdot w_{D1} + m_2 \cdot w_{D2} + m_4 \cdot w_{D4} = m_3 \cdot w_{D3} + m_5 \cdot w_{D5} \\ \text{dodatečný vztah 1:} & w_{A3} + w_{B3} + w_{C3} + w_{D3} = 1 \\ \text{dodatečný vztah 2:} & m_4 = m_5\end{aligned}$$

Stejně rovnice po dosazení:

$$\begin{aligned}\text{celková bilance:} & 1800 + 1200 + m_4 = m_3 + m_5 \\ \text{bilance složky A:} & 1800 \cdot 0,12 + 1200 \cdot 0 + m_4 \cdot 0 = m_3 \cdot w_{A3} + m_5 \cdot 0,466 \\ \text{bilance složky B:} & 1800 \cdot 0 + 1200 \cdot 0,15 + m_4 \cdot 0 = m_3 \cdot 0 + m_5 \cdot 0,534 \\ \text{bilance složky C:} & 1800 \cdot 0 + 1200 \cdot 0 + m_4 \cdot 0,829 = m_3 \cdot w_{C3} + m_5 \cdot 0 \\ \text{bilance složky D:} & 1800 \cdot 0,88 + 1200 \cdot 0,85 + m_4 \cdot 0,171 = m_3 \cdot w_{D3} + m_5 \cdot 0 \\ \text{dodatečný vztah 1:} & w_{A3} + 0 + w_{C3} + w_{D3} = 1 \\ \text{dodatečný vztah 2:} & m_4 = m_5\end{aligned}$$

Zjednodušený zápis s vynecháním nulových členů:

$$\begin{aligned}\text{celková bilance:} & 1800 + 1200 + m_4 = m_3 + m_5 \\ \text{bilance složky A:} & 1800 \cdot 0,12 = m_3 \cdot w_{A3} + m_5 \cdot 0,466 \\ \text{bilance složky B:} & 1200 \cdot 0,15 = m_5 \cdot 0,534 \\ \text{bilance složky C:} & m_4 \cdot 0,829 = m_3 \cdot w_{C3} \\ \text{bilance složky D:} & 1800 \cdot 0,88 + 1200 \cdot 0,85 + m_4 \cdot 0,171 = m_3 \cdot w_{D3} \\ \text{dodatečný vztah 1:} & w_{A3} + w_{C3} + w_{D3} = 1 \\ \text{dodatečný vztah 2:} & m_4 = m_5\end{aligned}$$

Výpočet: hledáme co nejjednodušší řešitelný subsystém (v první řadě tedy rovnici o jediné neznámé, pokud taková není, hledáme soustavu dvou rovnic o dvou neznámých atd.), ten vyřešíme, získané vypočtené hodnoty doplníme do matice zadání a dále s nimi pracujeme jako se známými hodnotami.

bilance složky B: rovnice o jedné neznámé, řešením získáme $m_5 = 337$ g
dodatečný vztah 2: dosadíme za m_5 , řešením získáme $m_4 = 337$ g
celková bilance: dosadíme za m_4 a m_5 , řešením získáme $m_3 = 3000$ g
bilance složky A: dosadíme za m_3 a m_5 , řešením získáme $w_{A3} = 0,020$
bilance složky C: dosadíme za m_3 a m_4 , řešením získáme $w_{C3} = 0,093$
dodatečný vztah 2: dosadíme za w_{A3} a w_{C3} , řešením získáme $w_{D3} = 0,887$

Kontrola:

Dosazením do bilance složky D (nepoužitá při výpočtu) ověříme, zda jsme počítali správně.

Odpověď:

Roztok po reakci bude obsahovat 2,0 hmotn. % kys. sírové, 9,3 hmotn. % síranu draselného a 88,7 hmotn. % vody.

	①	②	③	④	⑤
m_i / kg	1800	1200	3000	337	337
w_{Ai}	0,12	0	0,020	0	0,466
w_{Bi}	0	0,15	0	0	0,534
w_{Ci}	0	0	0,093	0,829	0
w_{Di}	0,88	0,85	0,887	0,171	0