

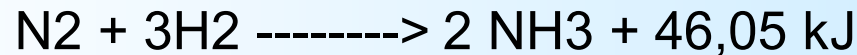
Haber-Boschova syntéza amoniaku (aneb počátek blahobytu)

Odkazy na net

- Nobelova cena
(<http://www.jergym.hiedu.cz/~canovm/mechanic/pravidl2/haber/haber.html>)
- Animace výroby NH₃
- Rovnice:
<http://dl.cuni.cz/cuni/mod/resource/view.php?id=9459>
- Další odkazy na významné reakce organických chemiků
- <http://www.jergym.hiedu.cz/~canovm/mechanic/pravidl2.html>

Amoniak

- Vlastní syntéza amoniaku ze syntézní směsi N₂ a H₂ probíhá katalytickou reakcí při vysokém tlaku a teplotě (20-100 kPa, 500) podle rovnice:



Vyrobený amoniak může být používán k přímému hnojení, nebo je výchozí surovinou pro výrobu kyseliny dusičné, ledků, močoviny, N roztoků, vícesložkových hnojiv.

Výroba dusíkatých hnojiv je energeticky náročná. Na výrobu 1 kg čistého N v hnojivu je zapotřebí podle druhu použité technologie 1,5 i více litrů nafty.

Základní vztahy k procvičení

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

$$\Delta G^\circ_{\text{reaction}} = \sum \text{coeff}_p \Delta G^\circ_f(\text{products}) - \sum \text{coeff}_r \Delta G^\circ_f(\text{reactants})$$



$$K_{\text{eq}} = \frac{[C]_{\text{eq}}^c [D]_{\text{eq}}^d}{[A]_{\text{eq}}^a [B]_{\text{eq}}^b}$$

$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

$Q < K_{\text{eq}}$ reaction goes to the right to make products.

$Q > K_{\text{eq}}$ reaction goes to the left to make reactants.

↑
The subscript "eq" indicates that these are equilibrium concentrations.

↑
These are not equilibrium concentrations.

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q$$

Q... **THE CONCENTRATION QUOTIENT**

$$0 = \Delta G^\circ + RT \ln K_{\text{eq}}$$

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_{\text{eq}}$$

Koncentrační kvocient

Kniha:

J. Olmsted III, G. M. Williams: Chemistry – The Molecular Science, Mosby – Year Book, Inc., 1994

$$K_{\text{eq}} = \frac{[C]_{\text{eq}}^c [D]_{\text{eq}}^d}{[A]_{\text{eq}}^a [B]_{\text{eq}}^b}$$



The subscript "eq" indicates that these are equilibrium concentrations.

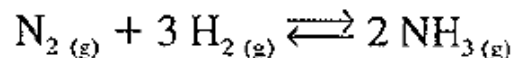
$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$



These are **not** equilibrium concentrations.

SIMPLE PROBLEM 15-9 THERMODYNAMICS AND K_{eq}

Using standard thermodynamic data, find the value of K_{eq} at 298 K for the Haber reaction:



METHOD: Equation 15-5 provides the link between thermodynamic data and K_{eq} . We must first calculate ΔG_{rxn}° from tabulated standard free energies of formation.

$$\Delta G_{rxn}^\circ = \sum (\text{coeff}) \Delta G_f^\circ (\text{products}) - \sum (\text{coeff}) \Delta G_f^\circ (\text{reactants})$$

Appendix E contains the appropriate values:

$$\Delta G_f^\circ (\text{kJ/mol}): \text{N}_2(g), 0; \text{H}_2(g), 0; \text{NH}_3(g), -16.4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G^\circ = (2 \text{ mol NH}_3)(-16.4 \text{ kJ/mol NH}_3) - 3(0) - 1(0) = -32.8 \text{ kJ}$$

To determine the equilibrium constant, Equation 15-5 must be rearranged to isolate $\ln K_{eq}$.

$$\ln K_{eq} = -\frac{\Delta G^\circ}{RT} = \frac{-(-32.8 \text{ kJ})(10^3 \text{ J/kJ})}{(8.314 \text{ J/K})(298 \text{ K})} = 13.24$$

$$K_{eq} = e^{13.4} = 5.6 \times 10^5 \text{ atm}^{-2}$$

The exponential gives a dimensionless number, since e^x is always a pure number. However, we assign units to K_{eq} as required by the concentration quotient. Remember that the superscript "o" in ΔG° refers to standard conditions that include concentrations of 1 M for solutes and 1 atm partial pressure for gases.