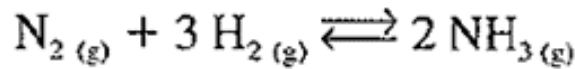


Syntéza amoniaku

Úkol: vypočtete rovnovážnou konstantu reakce při tlaku standardním ale jiné, nežli standardní t



Specie	H2	N2	NH3
v(i)=			

R= 8,31448

Vstupní data: [Standard State and Enthalpy of Formation, Gibbs Free Energy of Formation, Ent](#)

1. Vyhledejte hodnoty chybějících termodynamických funkcí a veličin v tabulkách za standardních poc

Substances - Standard State and Enthalpies of Formation, Gibbs Free Energies of Formation, Entropies and Heat Capacities

2. Vypočítejte termodynamické funkce a veličiny za zvolené teploty 35 °C

Předpokládejte, že Cp se v intervalu 25 až 235stC nemění.

p= 100 Atm= Pa

t= 25 °C = K

specie	ΔH_f kJ/mol	ΔU_f kJ/mol	ΔS_f kJ/mol	ΔG_f kJ/mol	C_p J/(K mol)	C_v J/(K mol)	ΔF_f kJ/mol
H ₂ (g)	0	#DIV/0!	130,7	0	28,8	20,48552	#DIV/0!
N ₂ (g)	0	#DIV/0!	191,6	0	29,1	20,78552	#DIV/0!
NH ₃ (g)	-45,9	#DIV/0!	192,8	-16,4	35,1	26,78552	#DIV/0!

3. Vypočtete změny termodynamických funkcí při reakci.

t= 25 °C = 298 K

t= Změna entalpi

Standardní reakční entalpie:

$\Delta H_r^0 =$ kJ/mol

Změna objemu při reakci:

Změna vnitřn

$\Delta V_r^0 =$ m³

Standardní reakční vnitřní energie:

Změna vnitřn

$\Delta U_r^0 =$ kJ/(mol)

Standardní reakční entropie:

Změna entrop

$\Delta S_r^0 =$ J/(K mol)

Standardní reakční Helmholtzova energie:

Změna Helmh

$\Delta F_r^0 =$ kJ/mol

Standardní reakční Gibbsova energie:

Změna Gibbs

$\Delta G_r^0 =$ kJ/mol

kontrola: 0 kJ/mol

4. Vypočtete rovnovážnou konstantu

t= 25 °C = 298 K

t=

Reakce v "pytlíku" umístěném v termostatu

Kr=

Reakce v autoklávu umístěném v termostatu

Kr=

eploř. V tlakově kompenzovaném (p,T, konst)
a uzavřeném (V,T, konst) isotermickém reaktoru.

J/(K mol)

[tropy and Heat Capacity \(engineeringtoolbox.com\)](http://www.engineeringtoolbox.com)

řmínek.

Postup:

Použij vztahy:

ktelé zjednoduř s použitím konstantní tepelné kapacit

t= 235 °C = K

specie	ΔH_f kJ/mol	ΔU_f kJ/mol	ΔS_f kJ/mol	ΔG_f kJ/mol	ΔF_f kJ/mol
H ₂	0	#DIV/0!	#DIV/0!	#DIV/0!	#DIV/0!
N ₂	0	#DIV/0!	#DIV/0!	#DIV/0!	#DIV/0!
NH ₃	-45,9	#DIV/0!	#DIV/0!	#DIV/0!	#DIV/0!

235 °C = 508 K

ie při reakci:

$\Delta H_r =$ kJ/mol

í energie při reakci:

$\Delta V_r =$ m³

í energie při reakci:

$\Delta U_r =$ kJ/(mol)

ie při reakci:

$\Delta S_r =$ J/(K mol)

olzovy energie při reakci:

$\Delta F_r =$ kJ/mol

ovy energie při reakci:

$\Delta G_r =$ kJ/mol

kontrola: 0 kJ/mol

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

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

235 °C = 508 K

Kr=

Kr=

$$\begin{aligned} \Delta H^\circ(298) &= (\Delta H_{\text{sl}}^\circ)_{\text{CO}_2} - (\Delta H_{\text{sl}}^\circ)_{\text{CO}} \\ \Delta a &= a_{\text{CO}_2} - a_{\text{CO}} - 0,5 \cdot a_{\text{O}_2} \\ \Delta b &= b_{\text{CO}_2} - b_{\text{CO}} - 0,5 \cdot b_{\text{O}_2} \\ \Delta c &= c_{\text{CO}_2} - c_{\text{CO}} - 0,5 \cdot c_{\text{O}_2} \\ \Delta H^\circ(T) &= \Delta H^\circ(298) + \int_{298}^T (\Delta a + \Delta bT + \Delta cT^2) dT = \\ &= \Delta H^\circ(298) - \Delta a \cdot 298 - \frac{\Delta b \cdot 298^2}{2} - \frac{\Delta c \cdot 298^3}{3} + \Delta aT + \frac{\Delta b \cdot T^2}{2} \end{aligned}$$

y

$$pV = nRT$$

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \Rightarrow dH = C_p dT \text{ pro } dp = 0$$

$$\Rightarrow \Delta S = S(T_2) - S(T_1) = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$$

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

Standardní reakční entalpie

$$\left(\Delta \tilde{H}_R^\circ \right)_{298} = \left(\Delta \tilde{H}_{c,R}^\circ \right)_{298} - \left(\Delta \tilde{H}_{c,P}^\circ \right)_{298}$$

$$\left(\Delta \tilde{H}_R^\circ \right)_{298} = - \sum \varphi_i \left(\Delta \tilde{H}_{c,i}^\circ \right)_{298}$$

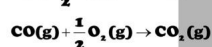
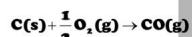
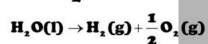
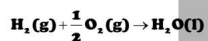
Termochemické zákony

Lavoisier

$$\Delta H_{A \rightarrow B} = -\Delta H_{B \rightarrow A}$$

Hess

$$\Delta H_{A \rightarrow C} = \Delta H_{A \rightarrow B} + \Delta H_{B \rightarrow C}$$



Termochemie

Helmholtzova

Dříve - volná energie

Definice: $F = U - TS$

$$\Delta F = \Delta U - T\Delta S - S\Delta T$$

Pro izotermický děj

$$T = \text{konst.} \Rightarrow \Delta T = 0 \Rightarrow \Delta F =$$

$$\Delta U - T\Delta S = W_{\text{rev}}$$

$$(\Delta F)_T = W_{\text{rev}}$$

Změna Helmholtzovy energie s
práci vyměněné mezi systémem
vratném izotermickém ději

$$\Delta G_r^\circ = \sum (\text{coeff}) \Delta G_f^\circ (\text{reactants})$$

Rovnovážná konstanta

$$K = \prod a_i^{v_i} \quad \Delta G_r^{\text{st}} = -RT \ln K$$

- hodnota závisí na zvoleném standardním stavu a zápisu chemické reakce

❖ Ideální soustava

– Guldberg-Waagův zákon

$$K_C = \prod C_i^{\nu_i} \quad K_P = \prod P_i^{\nu_i}$$

$$K_P = K_C (RT)^{\sum \nu_i}$$

$$\frac{T^2}{2} + \frac{\Delta c \cdot T^3}{3}$$

§

energie

$$\Delta U - T\Delta S$$

se rovná maximální
tem a okolím při

Entalpie H

$$\Delta U = Q - p \cdot \Delta V$$

za stálého tlaku izobarický děj
 $p = \text{konst.}$ $Q_p = \Delta H$

$$\Delta H = \Delta U + p \cdot \Delta V$$

Změna entalpie (ΔH) při reakci

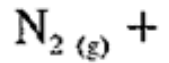
Reakce exotermické ($\Delta H < 0$)

Reakce endotermické ($\Delta H > 0$)

Úkol: Vypočtete závislost Gibbsovy energie při syntéze amoniaku za konstantního standardního tlaku, a teplotě 0 K v závislosti na rozsahu reakce. Objem reaktoru je 10

Do reaktoru bylo napařeno následující množství výchozích látek:

čas t=0	substance	mol	stech ν_i	ΔG_f
	H2	300		#DIV/0!
	N2	100		#DIV/0!
	NH3	0		#DIV/0!



step ξ (max) = mol obrátů

předpokládejte ideální chování s

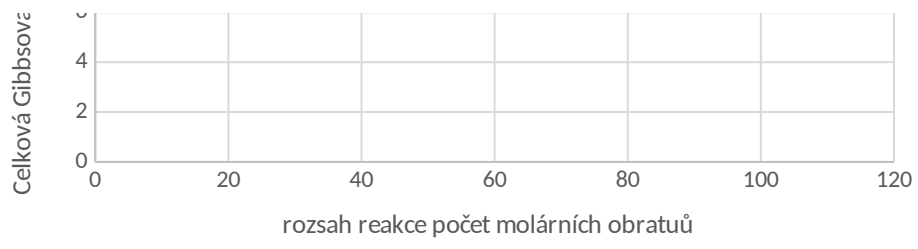
použij step ξ = 5 mol obrátů R= 8,31448 J/(K mol)

1. Vygeneruj osu rozsahu reakce, parciálních tlaků, perc. Gibbsovy energie složek a celkovou

rozsah ξ	n			parciální tlaky p_i/p_0			Parciální Gibbs energy		
	H2 mol	N2 mol	NH3 mol	H2	N2	NH3	H2 J/mol	N2 J/mol	NH3 J/mol
0									
5									
10									
15									
20									
25									
30									
35									
40									
45									
50									
55									
60									
65									
70									
75									
80									
85									
90									
95									
100									

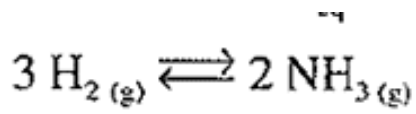
2. Vytvoř graf závislosti Gibbsovy energie na rozsahu reakce a na stupni konverze reakce.





101325 Pa,
m3

pro tuto teplotu platí:



měsi plynů.

specie	ΔG_f kJ/mol
H2 (g)	#DIV/0!
N2 (g)	#DIV/0!
NH3 (g)	#DIV/0!

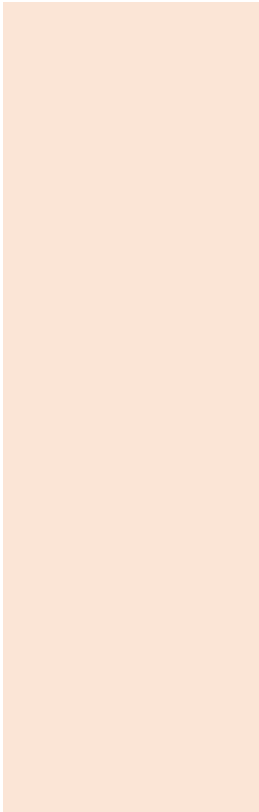
$$pV = nRT$$

Gibbs energie

celková stupeň konverze
 $\alpha = \xi / \xi_{max}$

$$\xi = (n_i - n_{i0}) / \nu_i$$

J/mol



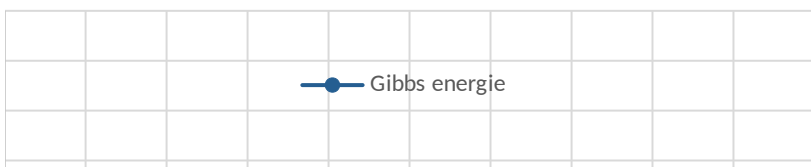
$$G(p) = G^\ominus + nRT \ln \frac{p}{p^\ominus}$$

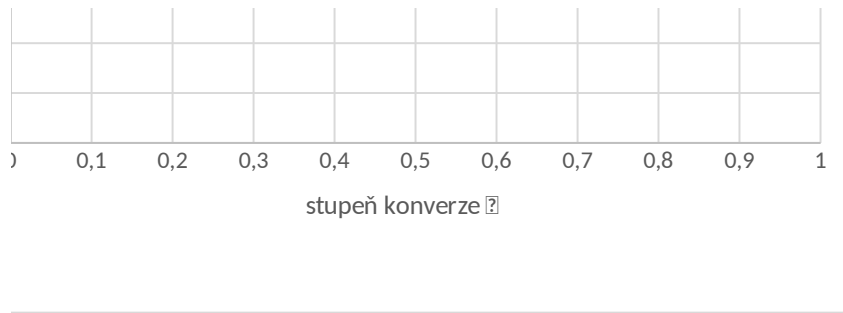
$$\mu = \frac{G}{n} \quad \text{chemický potenciál}$$

$$\mu(p) = \mu^\ominus + RT \ln \frac{p}{p^\ominus} \quad \dots \text{ic}$$

$$\mu(p) = \mu^\ominus + RT \ln \frac{f}{p^\ominus} \quad \dots \text{re}$$

Gibbs energie





↓

l(g)

zálný (g)