PROSESSTEKNIKK ØVING 3

Øving 4.2.98

Løsninger

Oppgave 1

a) Vi velger 1000 kg C_2H_4 som basis. Molvekten av C_2H_4 er 28.1 g mol^{-1}. Siden trykket er lavt, kan vi benytte ideell gasslov. For valgt basis finner vi:

Antall mol C_2H_4: $\dfrac{10^6 \text{ g}}{28.1 \text{ g mol}^{-1}} = 3.559 \times 10^4 \text{ mol}$

Antall mol O_2 brukt i forbrenningen: $3 \times 3.559 \times 10^4 \text{ mol} = 1.068 \times 10^5 \text{ mol}$

Antall mol luft brukt: $\dfrac{1.068 \times 10^5 \text{ mol}}{0.21} = 5.084 \times 10^5 \text{ mol}$

Volum luft inn:

$$\underline{V} = \frac{nRT}{p} = \frac{5.084 \times 10^5 \text{ mol} \times 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \times 298 \text{ K}}{1.013 \times 10^5 \text{ Pa}} = \underline{12400 \text{ m}^3}$$

(Tilsvarer ca. volumet av en av kjemiblokkene.)

b) Med samme basis finner vi:

Antall mol gass dannet: $4 \times 3.559 \times 10^4 \text{ mol} = 1.423 \times 10^5 \text{ mol}$

Antall mol N_2 i luft inn: $5.084 \times 10^5 \times 0.79 \text{ mol} = 4.016 \times 10^5 \text{ mol}$

Antall mol gass ut tilsammen: $5.439 \times 10^5 \text{ mol}$

Volum gass ut:

$$\underline{V} = \frac{nRT}{p} = \frac{5.439 \times 10^5 \text{ mol} \times 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \times 1173 \text{ K}}{0.9 \times 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}} = \underline{58200 \text{ m}^3}$$

Oppgave 2

Endring i entalpi for reaksjonen, $\Delta_r H^0$, er i dette tilfellet definert som

$$\Delta_r H = H(\text{CO}_2) + H(\text{H}_2) - H(\text{CO}) - H(\text{H}_2\text{O}) \qquad (1)$$

ved en gitt temperatur (100 °C). Ved en annen temperatur (1000 °C) kan hver av entalpiene

finnes som

$$H(1000\,^\circ\mathrm{C}) = H(100\,^\circ\mathrm{C}) + \int_{100\,^\circ\mathrm{C}}^{1000\,^\circ\mathrm{C}} C_p\,dT \qquad (2)$$

Vi kan da finne $\Delta_r H^0$ ved den nye temperaturen som

$$\Delta_r H(1000\,^\circ\mathrm{C}) = \Delta_r H(100\,^\circ\mathrm{C}) + \int_{100\,^\circ\mathrm{C}}^{1000\,^\circ\mathrm{C}} \Delta_r C_p\,dT \qquad (3)$$

der

$$\Delta_r C_p = C_p(\mathrm{CO_2}) + C_p(\mathrm{H_2}) - C_p(\mathrm{CO}) - C_p(\mathrm{H_2O})$$
$$= (37 + 29 - 29 - 34)\ \mathrm{J\ mol^{-1}\ K^{-1}} = 3\ \mathrm{J\ mol^{-1}\ K^{-1}}$$

Innsetting i lign. (3) gir

$$\Delta_r H(1000\,^\circ\mathrm{C}) = \Delta_r H(100\,^\circ\mathrm{C}) + 3\ \mathrm{J\ mol^{-1}\ K^{-1}} \times (1000 - 100)\ \mathrm{K}$$
$$= -40000\ \mathrm{J\ mol^{-1}} + 3\ \mathrm{J\ mol^{-1}} \times 900 = -37300\ \mathrm{J\ mol^{-1}} = -37.3\ \mathrm{kJ\ mol^{-1}}$$

Konklusjon: Reaksjonen er fortsatt eksoterm ved 1000 °C.

Oppgave 3

Vi velger ett mol H_2 som basis. Vi vet ikke hva slutt-temperaturen vil bli, men fordi reaksjonen er eksoterm, må den bli høyere enn 25 °C. Hvis den blir lavere enn 100 °C, må vi bruke $\Delta_f H^0$ for H_2O i væskefase. Hvis den blir høyere, må vi bruke $\Delta_f H^0$ for H_2O i gassfase. Vi må derfor gjøre en antagelse om utfallet (og huske å kontrollere antagelsen etterpå).Ved T = 298 K finner vi følgende tallverdier i SI:

$\Delta_f H^0$ (H_2O, g) = -242 kJ mol^{-1}

$\Delta_f H^0$ (H_2O, l) = -285 kJ mol^{-1}

C_p^0 (H_2O, g) = 34 J mol^{-1} K^{-1}

C_p^0 (H_2O, l) = 75 J mol^{-1} K^{-1}

C_p^0 (H_2, g) = 29 J mol^{-1} K^{-1}

C_p^0 (O_2, g) = 29 J mol^{-1} K^{-1}

C_p^0 (N_2, g) = 29 J mol^{-1} K^{-1}

a) Antagelse: Slutt-temperatur T > 373 K. På samme måte som i oppg. 2 finner vi:

$$\Delta_r H(T) = \Delta_r H(298\ \text{K}) + \int_{298\ \text{K}}^{T} \Delta_r C_p dT$$
$$= -242000\ \text{J mol}^{-1} + (34 - 29 - \tfrac{1}{2}29)\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1} \times (T - 298\ \text{K})$$
$$= -242000 - 9.5 \times (T - 298)\ \text{J mol}^{-1}$$

Av denne frigjorte varmemengden fjernes 99% og resten går med til å varme opp reaktantene. Antall mol gass som skal varmes opp er:

1 mol H_2 + 0.5 mol O_2 + $\dfrac{0.5 \times 0.79}{0.21}$ mol N_2, tilsammen 3.38 mol gass. Alle komponentene har samme varmekapasitet, 29 J mol^{-1} K^{-1}. Varmebalanse:

$$0.01 \times \left[242000\ \text{J mol}^{-1} + 9.5 \times (T - 298\ \text{K})\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}\right] = 3.38 \times 29\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}\ (T - 298\ \text{K})$$

som gir

$$2420\ \text{J mol}^{-1} = (3.38 \times 29 - 0.01 \times 9.5)\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}\ (T - 298\ \text{K})$$
$$= 97.925(T - 298\ \text{K})\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}$$
$$\therefore \underline{T} = 298\ \text{K} + \frac{2420}{97.925}\ \text{K} = \underline{323\ \text{K}}$$

Konklusjon: Antagelsen var feil.

b) Antagelse: Slutt-temperatur T < 373 K. I dette tilfellet finner vi:

$$\Delta_r H(T) = \Delta_r H(298\ \text{K}) + \int_{298\ \text{K}}^{T} \Delta_r C_p dT$$
$$= -285000\ \text{J mol}^{-1} + (75 - 29 - \tfrac{1}{2}29)\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1} \times (T - 298\ \text{K})$$
$$= -285000 - 31.5 \times (T - 298)\ \text{J mol}^{-1}$$

Antall mol gass som skal varmes opp er det samme som i antagelse a), 3.38 mol med samme varmekapasitet, 29 J mol^{-1} K^{-1}. Varmebalanse:

$$0.01 \times \left[285000\ \text{J mol}^{-1} + 31.5 \times (T - 298\ \text{K})\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}\right] = 3.38 \times 29\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}\ (T - 298\ \text{K})$$

som gir

$$2850\ \text{J mol}^{-1} = (3.38 \times 29 - 0.01 \times 31.5)\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}\ (T - 298\ \text{K})$$
$$= 97.705(T - 298\ \text{K})\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}$$
$$\therefore \underline{T} = 298\ \text{K} + \frac{2850}{97.705}\ \text{K} = \underline{327\ \text{K}}$$

Konklusjon: Antagelsen var riktig, og svaret er $\underline{T = 327\ \text{K}}$.