PROSESSTEKNIKK ØVING 3

Øving 4.2.99

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

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: $\frac{1.068 \times 10^5 \text{ mol}}{0.21} = 5.084 \times 10^5 \text{ mol}$

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: $4 \times 3.559 \times 10^4$ mol $= 1.423 \times 10^5$ mol

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

Antall mol gass ut tilsammen: 5.439×10^5 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

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

Innsetting i lign. (3) gir

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

Konklusjon: Reaksjonen er fortsatt eksoterm ved 1000 °C.

<u>Oppgave 3</u>

Vi velger ett mol H_2 som basis. Vi forutsetter som gitt i oppgaven at slutt-temperaturen blir høyere enn 100 °C, dvs. at alle komponentene er i gassfase. Da kan vi skrive reaksjonen på følgende måte:

H_2 (g, 25 °C) + 1/2 O_2 (g, 25 °C) $\rightarrow$ H_2O (g, 100 °C)

Fordi entalpien er en tilstandsfunksjon, spiller det ingen rolle om vi først varmer reaktantene (pluss inert gass) og deretter reagerer, eller først reagerer og så varmer opp. Vi velger det siste fordi $\Delta_f H^0$ (H_2O, g) er gitt ved 25 °C. H_2O (g) ved denne temperaturen er ikke stabil, men det spiller ingen rolle fordi den bare er et tenkt mellomtrinn på veg til en høyere temperatur. Fra SI trenger vi:

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

På samme måte som i oppg. 2 finner vi:

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

Av denne frigjorte varmemengden brukes 5% 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:

$$0.05\times\left[242000\ \mathrm{J\ mol^{-1}} + 9.5\times(T - 298\ \mathrm{K})\ \mathrm{J\ mol^{-1}\ K^{-1}}\right] = 3.38\times 29\ \mathrm{J\ mol^{-1}\ K^{-1}}\ (T - 298\ \mathrm{K})$$

som gir

$$\begin{aligned}12100\ \mathrm{J\ mol^{-1}} &= (3.38\times 29 - 0.05\times 9.5)\ \mathrm{J\ mol^{-1}\ K^{-1}}\ (T - 298\ \mathrm{K})\\ &= 97.545(T - 298\ \mathrm{K})\ \mathrm{J\ mol^{-1}\ K^{-1}}\\ \therefore \underline{\underline{T}} &= 298\ \mathrm{K} + \frac{12100}{97.545}\ \mathrm{K} = \underline{\underline{422\ \mathrm{K}}}\end{aligned}$$