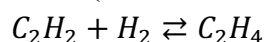


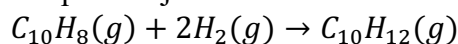


Chemická rovnováha – příklady do semináře:

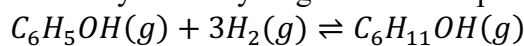
- 1) Standardní Gibbsovy slučovací energie jsou pro ethen při teplotě 25 °C 68.1 kJ/mol a ethyn 209.3 kJ/mol. Standardní slučovací entalpie jsou při téže teplotě pro ethen 52.34 kJ/mol a ethyn 226.9 kJ/mol. Určete standardní reakční Gibbsovu energii a rozhodněte, kterým směrem se bude ubíhat reakce a jak se projeví růst tlaku a teploty na průběh reakce. (-141.2 kJ/mol)



- 2) Rovnovážná konstanta hydrogenace naftalenu na tetrahydronaftalen má při teplotě 550 K hodnotu 1.22 (pro standardní stav 101.325 kPa). Vypočítejte tlak, který je zapotřebí pro dosažení stupně přeměny 0.8 při stechiometrickém poměru výchozích látek v nástřiku do reaktoru. Předpokládejte ideální chování ideálních plynů. (642 kPa)



- 3) Cyklohexanol se vyrábí katalytickou hydrogenací fenolu podle rovnice:

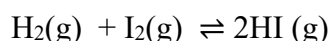


Při studiu této reakce za atmosférického tlaku a teploty 500 K byla do reaktoru dávkována směs 1 mol fenolu a 6 mol vodíku. Rovnovážná směs obsahovala 12.7 mol. % produktu. Vypočítejte rovnovážnou konstantu této reakce pro standardní stav $p^\ominus = 101.325 \text{ kPa}$, jestliže se plyny chovají ideálně. (3.49)



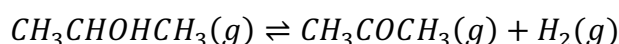
Chemická rovnováha – příklady k procvičení:

- 1) Směs připravená z 6.22 mol vodíku a 5.71 mol jodových par byla ponechána při 375 °C za atmosférického tlaku tak dlouho, až reakce



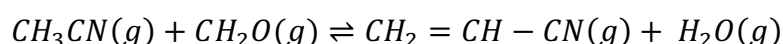
proběhla do rovnováhy. V rovnovážné směsi bylo nalezeno 0.91 mol nezreagovaného jódu. Vypočítejte rovnovážnou konstantu této reakce. (71.32)

- 2) Rovnovážnou konstantu izomerace butanu na 2-methylpropan má při teplotě 400 K hodnotu 2.1 pro standardní stav $p^\ominus=101.325 \text{ kPa}$. Vypočítejte, jaký podíl butanu při této teplotě izomeruje. (67.74%)
- 3) Rovnovážná konstanta dehydrogenace cyklopentanu na cyklopenten má při teplotě 700 K hodnotu 0.04487 a reakční teplo této reakce je 114.683 kJ/mol. Vypočítejte teplotu, při níž se hodnota rovnovážné konstanty zdvojnásobí. (725.52 K) (Použijte Van't Hoffovu rovnici)
- 4) Aceton se vyrábí dehydrogenací 2-propanolu podle rovnice:



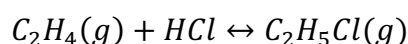
Při teplotě 500 K je standardní reakční entalpie této reakce 56.9 kJ/mol a standardní reakční entropie má hodnotu 120.66 Jmol⁻¹K⁻¹. Vypočítejte standardní reakční Gibbsovu energii, rovnovážnou konstantu a složení rovnovážné směsi (v mol. %), jestliže se plyny chovají ideálně a reakce probíhá za atmosférického tlaku. (-3.43kJ/mol, 2.28, 9.06% propanolu, 45.47% acetonu, 45.79% vodíku)

- 5) Acetonitril reaguje s formaldehydem za vzniku akrylonitrilu podle rovnice



Rovnovážná konstanta této reakce má při teplotě 1200 K hodnotu 3.692 (pro standardní stav $p^\ominus = 101.325 \text{ kPa}$). Vypočítejte obsah akrylonitrilu (v mol. %) v rovnovážné směsi, jestliže byl molární poměr surovin v nástřiku 1:1. Předpokládejme ideální chování (32.88%).

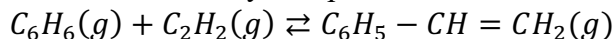
- 6) Při reakci benzenu s propenem na isopropylbenzen při teplotě 700 K, atmosférickém tlaku a stechiometrickém složení vstupní směsi stupeň přeměny dosáhne hodnoty 0.23. Jaký je třeba zvolit tlak, aby se stupeň přeměny ztrojnásobil? (1.388 MPa)
- 7) Reakce mezi ethenem a chlorovodíkem



byla studována v plynné fázi za teploty 500 K a za atmosférického tlaku. Do aparatury byla přivedena směs jednoho molu ethenu a jednoho molu chlorovodíku. Obsah chlorovodíku v rovnovážné směsi činil 30 mol.%. Vypočítejte rovnovážnou konstantu této reakce pro standardní stav $p^\ominus=101.325 \text{ kPa}$ za předpokladu ideálního chování plynných složek. (4,44)

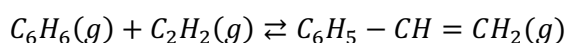
Ukázkový příklad:

Acetylen reaguje s benzenem za vzniku styrenu podle rovnice:



Rovnovážná konstanta této reakce v plynné fázi má při teplotě 1040 K hodnotu 4.457 pro standardní stav 101.325 kPa. Vypočítejte složení rovnovážné směsi za atmosférického tlaku:

- při ekvimolárním nástřiku výchozích složek
- při 100% ním přebytku acetylenu
- obsahuje-li vstupní směsi 35 mol. % acetylenu, 40 mol. % benzenu, 25 mol. % styrenu



$$T = 1040 \text{ K}$$

$$K = 4.457$$

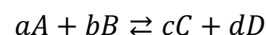
$$p^\ominus = 101.325 \text{ kPa}$$

$$p = 101.325 \text{ kPa}$$

$$x_S = ?$$

$$x_B = ?$$

$$x_A = ?$$



$$K = \frac{n_C^c \cdot n_D^d}{n_A^a \cdot n_B^b} \cdot \left(\frac{p}{p^\ominus} \right)^{\Delta v}$$

$$\Delta v = (c + d) - (a + b)$$

a)

	B (benzen)	A (acetylen)	S (styren)	
před reakcí	1	1	0	
rovnováha	$1 - \alpha$	$1 - \alpha$	α	$\sum n = 1 - \alpha + 1 - \alpha + \alpha = 2 - \alpha$
				$\Delta v = 1 - (1 + 1) = -1$

$$K = \frac{n_S}{n_B \cdot n_A} \cdot \left(\frac{p}{p^\ominus} \right)^{\Delta v} = \frac{\alpha}{(1 - \alpha) \cdot (1 - \alpha)} \cdot \left(\frac{1}{2 - \alpha} \right)^{-1} = \frac{\alpha \cdot (2 - \alpha)}{(1 - \alpha)^2}$$

$$K = \frac{\alpha \cdot (2 - \alpha)}{(1 - \alpha)^2}$$

$$K \cdot (1 - 2\alpha + \alpha^2) = 2\alpha - \alpha^2$$

$$(K + 1) \cdot \alpha^2 + (-2K - 2) \cdot \alpha + K = 0$$

$$5.457 \cdot \alpha^2 - 10.914 \cdot \alpha + 4.457 = 0$$

$$\alpha_1 = \frac{10.914 + \sqrt{(-10.914)^2 - 4 \cdot 5.457 \cdot 4.457}}{2 \cdot 5.457} = 1.43 \text{ X}$$

$$\alpha_2 = \frac{10.914 - \sqrt{(-10.914)^2 - 4 \cdot 5.457 \cdot 4.457}}{2 \cdot 5.457} = \underline{0.5719}$$

$$x_S = \frac{\alpha}{2 - \alpha} = \frac{0.5719}{2 - 0.5719} = 0.4004 \approx 40.04 \text{ mol. \%}$$

$$x_B = \frac{1 - \alpha}{2 - \alpha} = 0.2998 \approx 29.98 \text{ mol. \%}$$

$$x_A = \frac{1 - \alpha}{2 - \alpha} = 0.2998 \approx 29.98 \text{ mol. \%}$$

b)

	B (benzen)	A (acetylen)	S (styren)	
před reakcí	1	2	0	
rovnováha	$1 - \alpha$	$2 - \alpha$	α	$\sum n = 1 - \alpha + 2 - \alpha + \alpha = 3 - \alpha$
				$\Delta v = 1 - (1 + 1) = -1$

$$K = \frac{n_S}{n_B \cdot n_A} \cdot \left(\frac{p}{p^\ominus} \right)^{\Delta v} = \frac{\alpha}{(1 - \alpha) \cdot (2 - \alpha)} \cdot \left(\frac{1}{3 - \alpha} \right)^{-1} = \frac{\alpha \cdot (3 - \alpha)}{(1 - \alpha) \cdot (2 - \alpha)}$$

$$(K + 1) \cdot \alpha^2 + (-3K - 3) \cdot \alpha + 2 \cdot K = 0$$

$$5.457 \cdot \alpha^2 - 16.371 \cdot \alpha + 8.914 = 0$$

$$\alpha_1 = \frac{16.371 + \sqrt{(-16.371)^2 - 4 \cdot 5.457 \cdot 8.914}}{2 \cdot 5.457} = 2.285 \text{ X}$$

$$\alpha_2 = \frac{16.371 - \sqrt{(-16.371)^2 - 4 \cdot 5.457 \cdot 8.914}}{2 \cdot 5.457} = 0.7148$$

$$x_S = \frac{\alpha}{3 - \alpha} = \frac{0.7148}{3 - 0.7148} = 0.3128 \approx 31.28 \text{ mol. \%}$$

$$x_B = \frac{1 - \alpha}{3 - \alpha} = 0.1248 \approx 12.48 \text{ mol. \%}$$

$$x_A = \frac{2 - \alpha}{3 - \alpha} = 0.56248 \approx 56.24 \text{ mol. \%}$$

c)

	B (benzen)	A (acetylen)	S (styren)	
před reakcí	0.40	0.35	0.25	
rovnováha	$0.40 - \alpha$	$0.35 - \alpha$	$0.25 + \alpha$	$\sum n = 0.40 - \alpha + 0.35 - \alpha + 0.25 + \alpha = 1 - \alpha$
				$\Delta v = 1 - (1 + 1) = -1$

$$K = \frac{n_S}{n_B \cdot n_A} \cdot \left(\frac{p}{p^\ominus} \right)^{\Delta v} = \frac{(0.25 + \alpha)}{(0.4 - \alpha) \cdot (0.35 - \alpha)} \cdot \left(\frac{1}{1 - \alpha} \right)^{-1} = \frac{(0.25 + \alpha) \cdot (1 - \alpha)}{(0.4 - \alpha) \cdot (0.35 - \alpha)}$$

$$5.457 \cdot \alpha^2 - 4.09275 \cdot \alpha + 0.37398 = 0$$

$$\vdots$$

$$\alpha = 0.1065$$

$$x_S = \frac{0.25 + \alpha}{1 - \alpha} = \frac{0.25 + 0.1065}{1 - 0.1065} = 0.3990 \approx 39.90 \text{ mol. \%}$$

$$x_B = \frac{0.4 - \alpha}{1 - \alpha} = 0.3285 \approx 32.85 \text{ mol. \%}$$

$$x_A = \frac{0.35 - \alpha}{1 - \alpha} = 0.2725 \approx 27.25 \text{ mol. \%}$$