

Alkalmazott kémia 2019-2020 2. félév

Számítási gyakorlat
2020. 02. 18.

Domán Andrea
doman.andrea@mail.bme.hu

1

1. Példa

Mennyi hőt kell befektetni, ha 1 liter 25 °C-os etilalkoholt a forráspontjára melegítve párologtatunk el? Az etanol sűrűsége 25 °C-on 0,789 g/cm³.

Az etilalkohol fajhője 2,4 kJ/kg*K, párolgáshője 38,64 kJ/mol, forráspontja 78 °C.

Tételezzük fel, hogy a moláris hőkapacitások nem függenek a hőmérséklettől.

2

1. Példa - megoldás

1. Etilalkohol (EtOH) tömegének, anyagmennyiségének kiszámítása

$$\begin{aligned} V_{\text{EtOH}} &= 1 \text{ l} = 1 \text{ dm}^3 = 1000 \text{ cm}^3 \\ \rho_{\text{EtOH}} &= 0,789 \text{ g/cm}^3 \\ m_{\text{EtOH}} &= V_{\text{EtOH}} \cdot \rho_{\text{EtOH}} = 1000 \text{ cm}^3 \cdot 0,789 \text{ g/cm}^3 = 789 \text{ g} = \mathbf{0,789 \text{ kg}} \\ M_{\text{EtOH}} &= 46 \text{ g/mol} \\ n_{\text{EtOH}} &= m_{\text{EtOH}} / M_{\text{EtOH}} = 789 \text{ g} / 46 \text{ g/mol} = \mathbf{17,2 \text{ mol}} \end{aligned}$$

2. Izobár melegítés a forráspontra ($c_p = 2,4 \text{ kJ/kg}\cdot\text{K}$, $T_{\text{forr}} = 78 \text{ °C}$)

$$\begin{aligned} T_1 &= 25 \text{ °C} = 25 + 273,15 \text{ K} = 298,15 \text{ K} \\ T_{\text{forr}} &= 78 \text{ °C} = 78 + 273,15 \text{ K} = 351,15 \text{ K} \\ \Delta H_{\text{melegítés}} &= c_p \cdot m_{\text{EtOH}} \cdot \Delta T = 2,4 \text{ kJ/kg}\cdot\text{K} \cdot 0,789 \text{ kg} \cdot (351,15 \text{ K} - 298,15 \text{ K}) = \mathbf{100 \text{ kJ}} \end{aligned}$$

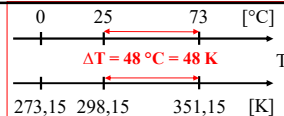
3. Izoterm, izobár fázisátalakulás ($\Delta H_{m,\text{pár,EtOH}} = 38,64 \text{ kJ/mol}$)

$$\Delta H_{\text{fázisátalakulás}} = \Delta H_{m,\text{pár,EtOH}} \cdot n_{\text{EtOH}} = 38,64 \text{ kJ/mol} \cdot 17,2 \text{ mol} = \mathbf{664,6 \text{ kJ}}$$

4. Teljes szükséges hőmennyiség

$$\Delta H = \Delta H_{\text{melegítés}} + \Delta H_{\text{fázisátalakulás}} = 100 \text{ kJ} + 664,6 \text{ kJ} = \mathbf{764,6 \text{ kJ}}$$

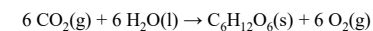
1 liter 25 °C-os etilalkohol forráspontján történő elpárologtatásához 764,6 kJ energia szükséges.



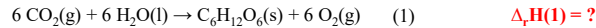
3

2. Példa

A fotoszintézis során glükóz termelődik. Számítsa ki a fotoszintézis standard reakcióentalpiáját 25 °C hőmérsékleten.



4

2. Példa - megoldás**1. Számítás képződéshőkből - $\Delta_r H$**

A képződéshő adatok kikeresése táblázatból.

$\Delta_f H_{\text{CO}_2(\text{g})}$	= -393,51 kJ/mol
$\Delta_f H_{\text{H}_2\text{O}(\text{l})}$	= -285,83 kJ/mol
$\Delta_f H_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{s})}$	= -1268 kJ/mol
$\Delta_f H_{\text{O}_2(\text{g})}$	= 0 kJ/mol (elem stabil módosulata)

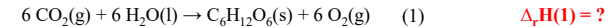
$$\begin{aligned} \Delta_r H &= \sum(v_k \cdot \Delta_f H_k) - \sum(v_k \cdot \Delta_f H_k) \\ &= (1 \text{ mol} \cdot \Delta_f H_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{s})} + 6 \text{ mol} \cdot \Delta_f H_{\text{O}_2(\text{g})}) - (6 \text{ mol} \cdot \Delta_f H_{\text{CO}_2(\text{g})} + 6 \text{ mol} \cdot \Delta_f H_{\text{H}_2\text{O}(\text{l})}) \\ &= (1 \text{ mol} \cdot (-1268 \text{ kJ/mol}) + 6 \text{ mol} \cdot 0 \text{ kJ/mol}) - (6 \text{ mol} \cdot (-393,51 \text{ kJ/mol}) + 6 \text{ mol} \cdot (-285,83 \text{ kJ/mol})) \end{aligned}$$

$$\Delta_r H = 2808 \text{ kJ}$$

A fotoszintézis standard reakcióentalpiája 2808 kJ.

$\Delta_f H$: standard moláris képződéshő / standard moláris képződési entalpia	[kJ/mol]
$\Delta_c H$: standard moláris égéshő / standard moláris égési entalpia	[kJ/mol]
$\Delta_r H$: standard reakcióhő / standard reakcióentalpia	[kJ]
v : sztöchiometriai együttható	
t : termékre vonatkozó mennyiség	
k : kiindulási anyagra vonatkozó mennyiség	

5

2. Példa - megoldás**2. Számítás égéshőből**

Az égéshő adatok kikeresése táblázatból.

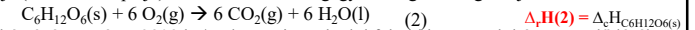
$\Delta_c H_{\text{CO}_2(\text{g})}$	= 0 kJ/mol (definíció szerint)
$\Delta_c H_{\text{H}_2\text{O}(\text{l})}$	= 0 kJ/mol (definíció szerint)
$\Delta_c H_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{s})}$	= -2808 kJ/mol
$\Delta_c H_{\text{O}_2(\text{g})}$	= 0 kJ/mol (definíció szerint)

$$\begin{aligned} \Delta_r H &= \sum(v_k \cdot \Delta_c H_k) - \sum(v_k \cdot \Delta_c H_k) \\ &= (6 \text{ mol} \cdot \Delta_c H_{\text{CO}_2(\text{g})} + 6 \text{ mol} \cdot \Delta_c H_{\text{H}_2\text{O}(\text{l})}) - (1 \text{ mol} \cdot \Delta_c H_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{s})} + 6 \text{ mol} \cdot \Delta_c H_{\text{O}_2(\text{g})}) \\ &= (6 \text{ mol} \cdot (0 \text{ kJ/mol}) + 6 \text{ mol} \cdot (0 \text{ kJ/mol})) - (1 \text{ mol} \cdot (-2808 \text{ kJ/mol}) + 6 \text{ mol} \cdot 0 \text{ kJ/mol}) \end{aligned}$$

$$\Delta_r H = 2808 \text{ kJ}$$

3. Égés – Reakcióhő kapcsolata

Vegyük észre, hogy a felírt (1)-es reakció megfordítva a glükóz égési reakciója (ld. (2)-es reakció), melynek reakcióhője (reakcióentalpiája) definíció szerint megegyezik a glükóz égéshőjével.



Belátható, ha a glükóz égése során – 2808 kJ/mol energia szabadul fel, akkor a glükóz termelődéséhez abszolút értékben megegyező energiát kell befektetni, tehát az (1)-es egyenlet reakcióhője a glükóz égéshőjének -1 szerese: $\Delta_r H = 2808 \text{ kJ}$ -t.

6

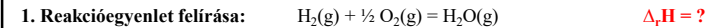
3. Példa

A gőz halmazállapotú víz képződési entalpiája 25 °C-on 10⁵ Pa nyomáson -241,82 kJ/mol. Határozzuk meg a reakció standard entalpiáját 100 °C-on. Ha a moláris hőkapacitások a következők:

$$\text{H}_2\text{O}(\text{g}) \text{ 33,58 J/mol}\cdot\text{K}; \text{H}_2(\text{g}) \text{ 28,84 J/mol}\cdot\text{K}; \text{O}_2(\text{g}) \text{ 29,37 J/mol}\cdot\text{K}$$

Tételezzük fel, hogy a moláris hőkapacitások nem függenek a hőmérséklettől.

7

3. Példa - megoldás**2. Izobár melegítés 100 °C-ra:**

$$\begin{aligned} \Delta H_{\text{H}_2\text{O}} &= C_{m,p,\text{H}_2\text{O}} \cdot n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \Delta T = 33,58 \text{ J/mol}\cdot\text{K} \cdot 1 \text{ mol} \cdot (373 \text{ K} - 298 \text{ K}) = 2518,5 \text{ J} \rightarrow 1 \text{ mol H}_2\text{O} \\ \Delta H_{\text{H}_2} &= C_{m,p,\text{H}_2} \cdot n_{\text{H}_2} \cdot \Delta T = 28,84 \text{ J/mol}\cdot\text{K} \cdot 1 \text{ mol} \cdot (373 \text{ K} - 298 \text{ K}) = 2163 \text{ J} \rightarrow 1 \text{ mol H}_2 \\ \Delta H_{\text{O}_2} &= C_{m,p,\text{O}_2} \cdot n_{\text{O}_2} \cdot \Delta T = 29,37 \text{ J/mol}\cdot\text{K} \cdot 0,5 \text{ mol} \cdot (373 \text{ K} - 298 \text{ K}) = 1101 \text{ J} \rightarrow 0,5 \text{ mol O}_2 \end{aligned}$$

3. Képződéshők 100 °C-on:

$$\begin{aligned} \text{a) } \Delta_f H_{\text{H}_2\text{O}} &= \Delta_f H_{\text{H}_2\text{O}}^0 + \Delta H_{\text{H}_2\text{O}} = -241820 \text{ J} + 2518,5 \text{ J} = -239301,5 \text{ J} \rightarrow 1 \text{ mol H}_2\text{O} (= \\ \text{b) } \Delta_f H_{\text{H}_2} &= \Delta_f H_{\text{H}_2}^0 + \Delta H_{\text{H}_2} = 0 \text{ J} + 2163 \text{ J} = 2163 \text{ J} \rightarrow 1 \text{ mol H}_2 \\ \text{c) } \Delta_f H_{\text{O}_2} &= \Delta_f H_{\text{O}_2}^0 + \Delta H_{\text{O}_2} = 0 \text{ J} + 1101 \text{ J} = 1101 \text{ J} \rightarrow 0,5 \text{ mol O}_2 \end{aligned}$$

4. Standard reakció entalpia = standard reakcióhő számítása 100 °C-on képződéshőkből:

$$\Delta_r H = \sum(v_k \cdot \Delta_f H_k) - \sum(v_k \cdot \Delta_f H_k) = \Delta_f H_{\text{H}_2\text{O}} - (\Delta_f H_{\text{H}_2} + \Delta_f H_{\text{O}_2}) = -239301,5 \text{ J} - (2163 \text{ J} + 1101 \text{ J}) = -242565,5 \text{ J}$$

$$\Delta_r H = -242,56 \text{ kJ}$$

A reakció standard entalpiája 100 °C-on 242,56 kJ

8

4. Példa

Mekkora a levegőben a N_2 illetve az O_2 parciális nyomása, ha feltételezzük, hogy a levegő V/V %-os összetétele 21 %-os O_2 -re és 79 %-os N_2 -re nézve.

9

4. Példa - megoldás

$$V/V \% = V_i/V_\delta * 100 \quad / \text{Dalton törvény} \rightarrow p_i/p_\delta = V_i/V_\delta$$

$$V/V \% = p_i/p_\delta * 100 \quad / p_\delta = p_{\text{égbkörü}} = 101325 \text{ Pa}$$

$$21 = p_{O_2}/101325 \text{ Pa} * 100$$

$$p_{O_2} = 21278,25 \text{ Pa}$$

$$79 = p_{N_2}/101325 \text{ Pa} * 100$$

$$p_{N_2} = 80046,75 \text{ Pa}$$

Az O_2 parciális nyomása 21278,25 Pa, a N_2 parciális nyomása pedig 80046,75 Pa.

Dalton törvény

$$p_i = p_\delta * x_i$$

$$x_i = n_i / n_\delta$$

$$p_i = p_\delta * n_i/n_\delta$$

$$p_i/p_\delta = n_i/n_\delta$$

$$p_i = p_\delta * \Phi_i$$

$$\Phi_i = V_i / V_\delta$$

$$p_i = p_\delta * V_i/V_\delta$$

$$p_i/p_\delta = V_i/V_\delta$$

p_i : i-edik komponens parciális nyomása

p_δ : össznyomás

Φ_i : térfogattört

V_i : i-edik komponens parciális térfogata

V_δ : össztérfogat

x_i : móltört

n_i : i-edik komponens moljainak száma

n_δ : összmolszám

10

5. Példa

Egy gáz 100 °C-on és 100,26 kPa nyomáson 500 cm³ teret tölt be. Mekkora ennek a gáznak a térfogata normál körülmények (0 °C, 101325 Pa) között?

11

5. Példa - megoldás

$$T_1 = 100 \text{ °C} = 100 + 273,15 \text{ K} = 373,15 \text{ K}$$

$$p_1 = 100,26 \text{ kPa} = 100,26 * 1000 \text{ Pa} = 100260 \text{ Pa}$$

$$V_1 = 500 \text{ cm}^3 = 500 * 10^{-6} \text{ m}^3 = 5 * 10^{-4} \text{ m}^3$$

$$T_2 = 0 \text{ °C} = 0 + 273,15 \text{ K} = 273,15 \text{ K}$$

$$p_2 = 101325 \text{ Pa}$$

$$V_2 = ?$$

Egyetemes gáztörvény ($pV=nRT$) alapján

$$p_1 * V_1 = n * R * T_1 \rightarrow n * R = (p_1 * V_1) / T_1$$

$$p_2 * V_2 = n * R * T_2 \rightarrow n * R = (p_2 * V_2) / T_2$$

$$\rightarrow (p_1 * V_1) / T_1 = (p_2 * V_2) / T_2$$

$$\rightarrow (100260 \text{ Pa} / 5 * 10^{-4} \text{ m}^3) / 373,15 \text{ K} = (101325 \text{ Pa} * V_2) / 273,15 \text{ K}$$

$$\rightarrow V_2 = (100260 \text{ Pa} * 5 * 10^{-4} \text{ m}^3 * 273,15 \text{ K}) / (373,15 \text{ K} * 101325 \text{ Pa}) = 3,6 * 10^{-4} \text{ m}^3 = 360 \text{ cm}^3$$

A gáz térfogata normál körülmények között 360 cm³.

12