

6. feladatsor

Feladatok

21. A n-hexán standard kémiai potenciálja 25 °C-on -285,98 kJ/mol. Számítsuk ki n-hexán és n-heptán (ideális) elegyében a n-hexán kémiai potenciálját, ha a móltörtje

- a) 0,2
- b) 0,5

Megoldás

$$\mu_h = \mu_h^0 + RT \ln x_h$$

$$\text{a) } \mu_h = -285\,980 + 8,314 \cdot 298 \cdot \ln 0,2 = -285\,980 - 3\,990 = -289\,970 \text{ J/mol} = \underline{-289,97 \text{ kJ/mol}}$$

$$\text{b) } \mu_h = -285\,980 + 8,314 \cdot 298 \cdot \ln 0,5 = -285\,980 - 1\,720 = -287\,700 \text{ J/mol} = \underline{-287,70 \text{ kJ/mol}}$$

Kisebb móltörthöz kisebb (negatívabb) kémiai potenciál tartozik.

22. Bizonyítsuk be, hogy kétkomponensű ideális elegyben 0,5-ös móltört esetében maximális a moláris elegyedési entrópia.

Tipp: A $\Delta_e S_m = -R \cdot (x_1 \cdot \ln x_1 + x_2 \cdot \ln x_2)$ szélső értékét keressük, vagyis azt az x értéket, amelynél a függvény deriváltja 0. (Alakítsuk a függvényt egyváltozósá úgy, hogy x_1 -et kifejezzük x_2 segítségével.)

Megoldás

$$\Delta_e S_m = -R \cdot (x_1 \cdot \ln x_1 + x_2 \cdot \ln x_2) = -R \cdot [(1-x_2) \cdot \ln(1-x_2) + x_2 \cdot \ln x_2]$$

A $z = (1-x_2) \cdot \ln(1-x_2) + x_2 \cdot \ln x_2$ függvény maximumát keressük: $\partial z / \partial x_2 = 0$

Szorzatfüggvény deriváltja: $(u \cdot v)' = u' \cdot v + u \cdot v'$

$$-\ln(1-x_2) + (1-x_2) \cdot \frac{-1}{1-x_2} + \ln x_2 + \frac{x_2}{x_2} = 0$$

$$-\ln(1-x_2) - 1 + \ln x_2 + 1 = 0$$

$$\ln \frac{x_2}{1-x_2} = 0 \quad \frac{x_2}{1-x_2} = 1, \quad \underline{x_2 = 0,5}$$

23. Számítsuk ki a moláris elegyedési entrópiát és a moláris elegyedési szabadentalpiát n-hexán és n-heptán (ideális) elegyében 25 °C-on, ha a n-hexán móltörtje

- a) 0,2
- b) 0,5

Megoldás

$$\Delta_e S_m = -R \cdot (x_1 \cdot \ln x_1 + x_2 \cdot \ln x_2), \quad \Delta_e G_m = -T \cdot \Delta_e S_m \text{ (mert } \Delta_e H_m = 0)$$

$$\text{a) } \Delta_e S_m = -8,314 \cdot (0,2 \cdot \ln 0,2 + 0,8 \cdot \ln 0,8) = \underline{4,16 \text{ J/molK}}$$

$$\Delta_e G_m = -298 \cdot 4,16 = \underline{-1240 \text{ J/mol}}$$

$$\text{b) } \Delta_e S_m = -8,314 \cdot (0,5 \cdot \ln 0,5 + 0,5 \cdot \ln 0,5) = \underline{5,76 \text{ J/molK}}$$

$$\Delta_e G_m = -298 \cdot 5,76 = \underline{-1720 \text{ J/mol}}$$

24. Két egymással elegyedő folyadék, az etanol (1) és a szén-diszulfid (2) tenziója 20 °C-on $p_1^* = 5,84$ kPa, $p_2^* = 39,52$ kPa. Az $x_2 = 0,40$ összetételű folyadékeleggyel $y_2 = 0,887$ összetételű gőz tart egyensúlyt. Az össz-nyomás 41,33 kPa. Mekkora az aktivitási koefficiensek a folyadékeleggyben?

Megoldás

$$p_i = \gamma_i \cdot x_i \cdot p_i^* = y_i \cdot p, \quad \gamma_i = (y_i \cdot p) / (x_i \cdot p_i^*)$$

$$\underline{\gamma}_1 = (0,113 \cdot 41,33) / (0,60 \cdot 5,84) = \underline{1,33}$$

$$\underline{\gamma}_2 = (0,887 \cdot 41,33) / (0,40 \cdot 39,52) = \underline{2,32}$$

25. A n-butanol és a víz korlátozottan elegyednek egymásban. 93 °C-on és 1 bar nyomáson a butanolban dúsabb folyadékfázisban a butanol móltörtje 0,34, racionális aktivitási koefficiense 1,9. A vízben dúsabb folyadékfázisban a butanol móltörtje 0,025. Mennyi a butanol racionális aktivitási koefficiense ebben a fázisban?

Megoldás

Egyensúlyban a butanol kémiai potenciálja, így a (racionális aktivitása) is megegyezik a két fázisban: $\gamma_b^b \cdot x_b^b = \gamma_b^v \cdot x_b^v$, ahol a felső indexek a fázisra, az alsók a komponensre utalnak. $\underline{\gamma}_b^v = (\gamma_b^b \cdot x_b^b) / x_b^v = 1,9 \cdot 0,34 / 0,025 = \underline{25,8}$.

26. Az ideális oldhatóságot leíró alábbi egyenletből fejezzük ki a hőmérsékletet, azaz rendezzük át úgy az egyenletet, hogy a baloldalon csak T szerepeljen.

$$\ln x_A = \frac{\Delta H_{mA}(olv)}{R} \left(\frac{1}{T_{0A}} - \frac{1}{T} \right)$$

Megoldás

$$\frac{1}{T_{0A}} - \frac{1}{T} = \frac{\ln x_A \cdot R}{\Delta H_{mA}(olv)} \quad \frac{1}{T} = \frac{1}{T_{0A}} - \frac{\ln x_A \cdot R}{\Delta H_{mA}(olv)} = \frac{\Delta H_{mA}(olv) - R \cdot T_{0A} \cdot \ln x_A}{T_{0A} \cdot \Delta H_{mA}(olv)}$$

$$T = \frac{T_{0A} \cdot \Delta H_{mA}(olv)}{\Delta H_{mA}(olv) - R \cdot T_{0A} \cdot \ln x_A}$$

Célszerű a számlálót is és a nevezőt is elosztani az olvadáshővel.

$$T = \frac{T_{0A}}{1 - \frac{R \cdot T_{0A}}{\Delta H_{mA}(olv)} \cdot \ln x_A}$$

Így ha fagyáspontgörbét akarunk szerkeszteni, elég egyszer kiszámítani $\ln x_A$ együttthatóját a nevezőben, majd a móltört helyébe különböző értékeket helyettesítve kiszámíthatjuk a fagyáspontokat.

27. 2,423 g ként 100 g naftalinban oldva a fagyáspont-csökkenés 0,641 °C. Hány atomos a naftalinban oldott kénmolekula?

A naftalin olvadáshője 19,0 kJ/mol, olvadáspontja 80,2 °C, móltömege 128 g/mol.

Tipp: Először számítsuk ki a naftalin móltörtjét az

$$\ln x_A = \frac{\Delta H_{mA}(\text{olv})}{R} \left(\frac{1}{T_{0A}} - \frac{1}{T} \right)$$

összefüggés segítségével.

Megoldás

Helyesebb lett volna így megadni a fagyáspont-csökkenést: 0,641 K. (A hőmérsékletet megadhatjuk °C-ban vagy Kelvinben, de a különbség „hivatalosan” mindig Kelvin.)

$$\ln x_N = \frac{19000}{8,314} \cdot \frac{-0,641}{353,4 \cdot 352,8} = -0,01175$$

Megjegyzés: a különbséget pontosan (három tizedesre) kellett beírni, az abszolút hőmérsékleteket elég volt egy tizedesre (ez így is négy értékes jegy).

$x_N = 0,9883$. A kén móltörtje: 0,0117. A keresett móltömeg M. Jelöljük 2,423/M-et y-nal.

$$0,0117 = \frac{\frac{2,423}{M}}{\frac{2,423}{M} + \frac{100}{128}} = \frac{y}{y + 0,781}$$

$y = 0,00925$, $M = 262 \text{ g/mol}$ $262/32 \approx \underline{8 \text{ atomos}}$.