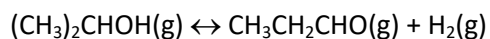


**A-1.** Izopropanol se dehidrogenira u plinskoj fazi pri čemu nastaje propionaldehid prema izrazu:



Standardna reakcijska Gibbsova energija (pri 298,15 K) je 17,74 kJ/mol, a standardna reakcijska entalpija iznosi 55,48 kJ/mol. Toplinska funkcija (stehiometrijska suma molarnih toplinskih kapaciteta) neovisna o temperaturi iznosi 16,736 J/(mol K).

Treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese pri 500 K i 1,013 bar. (Sandler)

**A-2.** Ravnotežni disocijacijski tlak kalcijeva oksalata u reakciji:

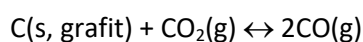


tabeliran je pri različitim temperaturama:

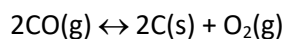
| $T/^\circ\text{C}$ | $p/\text{kPa}$ |
|--------------------|----------------|
| 375                | 1,09           |
| 388                | 4,00           |
| 403                | 17,86          |
| 410                | 33,33          |
| 416                | 78,25          |
| 418                | 91,18          |

Treba izračunati reakcijsku Gibbsovu energiju, reakcijsku entalpiju i reakcijsku entropiju za tu reakciju za temperaturno područje koje pokriva tablica. (Sandler)

**A-3.** Ugljikov dioksid reagira s grafitom pri čemu nastaje ugljikov monoksid:

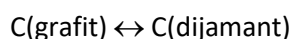


a nastali ugljikov monoksid dalje može reagirati pri čemu nastaje ugljik i kisik:



Treba odrediti ravnotežni sastav reakcijske smjese za slučaj kada se čisti ugljikov dioksid prevodi preko vrućega sloja ugljika pri 1 bar i (a) 2000 K ili (b) 1000 K. (Sandler)

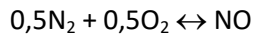
**A-4.** Doseg reakcije općenito ovisi i tlaku i temperaturi. Za reakciju (ili fazni prijelaz):



standardna reakcijska Gibbsova energija pri 25°C iznosi 2866 J/mol. Gustoća grafita je 2,25 g/cm<sup>3</sup> a gustoća dijamanta je približno 3,51 g/cm<sup>3</sup>. Obje se krutine mogu smatrati nestlačivima. Planira se opremiti laboratorij za provođenje te reakcije u studentskome laboratoriju.

Treba procijeniti koji je tlak pri sobnoj temperaturi (25°C) potreban za provedbu predložene transformacije otpadnih grafitnih mina u dijamante. (Sandler)

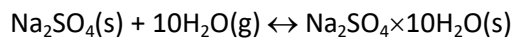
**A-5.** NO nastaje izravnom oksidacijom dušika:



u motorima s unutrašnjim sagorijevanjem. Reakcija služi i za komercijalnu proizvodnju dušikovih oksida u električnom luku procesom po Berkelandu i Eydeu.

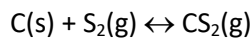
Treba izračunati ravnotežnu konverziju kisika pri ukupnom tlaku od 1 atm u temperaturnom području od 1500 do 3000°C uz zrak kao pojnu smjesu (21 % kisika i 79 % dušika). (Sandler)

**A-6.** Kristalni natrijev sulfat u prisutnosti vodene pare prevodi se u dekahidrat:



Treba procijeniti (a) minimalni parcijalni tlak vodene pare pri kojem će nastati dekahidrat pri 25°C i (b) grubo procijeniti isti taj tlak pri 15°C. (Sandler)

**A-7.** Reakcijom ugljika i sumpora pri visokim temperaturama izravno nastaje ugljikov disulfid:



Reakcija se provodi u retorti pri niskom tlaku, u odsutnosti kisika i drugih tvari koje mogu reagirati s ugljikom ili sumporom.

Treba izračunati ravnotežnu konverziju sumpora pri 750°C i 1000°C. (Sandler)

**A-8.** Podaci u tablici daju topljivost AgCl u različitim vodenim otopinama pri 25°C:

| Elektrolit                        | Koncentracija dodane soli<br>(mol/m <sup>3</sup> ) | Koncentracija AgCl<br>(mol/m <sup>3</sup> ) |
|-----------------------------------|--|---|
| Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> | 0,2111   | 1,309×10 <sup>-2</sup>                      |
|                                   | 0,7064   | 1,339×10 <sup>-2</sup>                      |
|                                   | 4,402  | 1,450×10 <sup>-2</sup>                      |
|                                   | 5,600  | 1,467×10 <sup>-2</sup>                      |
| La(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> | 0,1438   | 1,317×10 <sup>-2</sup>                      |
|                                   | 0,578  | 1,367×10 <sup>-2</sup>                      |
|                                   | 1,660  | 1,432×10 <sup>-2</sup>                      |
|                                   | 2,807  | 1,477×10 <sup>-2</sup>                      |

Treba prirediti dijagram ovisnosti produkta topljivosti o kvadratnome korijenu ionske jakosti. (Sandler)

**A-9.** U tablici su prikazani podaci o topljivosti barijeva sulfata u vodi:

|                                  |        |        |        |        |        |
|----------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Temperatura (°C)                 | 5      | 10     | 15     | 20     | 25     |
| Topljivost (mol/m <sup>3</sup> ) | 0,0156 | 0,0167 | 0,0183 | 0,0198 | 0,0216 |
| $\alpha$ (mol/L) <sup>-0,5</sup> | 1,140  | 1,149  | 1,158  | 1,167  | 1,178  |

Srednji koeficijent aktivnosti  $\gamma_{\pm}$  za ione soli pri niskim ionskim jakostima je:

$$\ln \gamma_{\pm} = -\alpha |z_+ z_-| I^{0,5}.$$

a) Treba izračunati  $K_s^\circ$ , produkt topljivosti barijeva sulfata u idealnoj otopine pri svim tabeliranim temperaturama

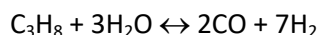
b) Pri svim tabeliranim temperaturama treba izračunati Gibbsovu reakcijsku energiju za reakciju:



gdje (s) označava čistu krutinu, a (aq,  $M = 1$ , idealna otopina) označava stanje iona u hipotetskoj idealnoj vodenoj otopini pri jediničnom molalitetu.

c) Za istu tu reakciju treba izračunati reakcijsku entalpiju i reakcijsku entropiju pri temperaturama od 5, 15 i 25°C. (Sandler)

**A-10.** Vodik se može proizvesti reakcijom propana i vodene pare uz nikal kao katalizator:

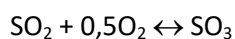


a) Treba izračunati reakcijsku entalpiju i reakcijsku Gibbsovu energiju za svaku od reakcija pri 1000 i 1100 K.

b) Treba izračunati ravnotežni sastav plinovitoga produkta pri 1000 K i 1 bar za pojnu smjesu propana i vodene pare u omjeru 1:10.

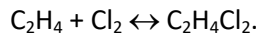
c) Treba izračunati ravnotežni sastav plinovitoga produkta pri 1100 K i 1 bar za pojnu smjesu propana i vodene pare u omjeru 1:10. (Sandler)

**A-11.** Važan korak u proizvodnji sumporne kiseline je oksidacija u plinskoj fazi:



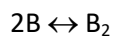
Treba izračunati ravnotežnu konverziju sumporova dioksida u sumporov trioksid u temperaturnome području od 0 do 1400°C za pojnu smjesu koja se koristi o čistoga sumporova dioksida i stehiometrijske količine zraka pri ukupnome tlaku od 1 atm (zrak je 21 % kisika i 79 % dušika. (Sandler).

**A-12.** Dikloretan se proizvodi izravnim kloriranjem etilena uz malu količinu dibrometana kao katalizatora:



Treba izračunati ravnotežnu konverziju etilena pri 50°C i 1 bar za pojnu smjesu koja se sastoji od stehiometrijskoga omjera etilena i klora. Atmosfersko vrelište dikloretana je 83,47°C. (Sandler)

**A-13.** Interakcije polarnih molekula na većim udaljenostima snažnije su nego one nepolarnih molekula i stoga one tvore neidealne otopine. Jedan od modela za opisivanje neidealnosti otopine nepolarne tvari (A) i polarne tvari (B) počiva na pretpostavci da će polarna tvar djelomice dimerizirati:



Iako se otopina makroskopski promatra kao dvokomponentna smjesa s molarnim udjelima  $x_A = N_{A0}/(N_{A0}+N_{B0})$  i  $x_B = N_{B0}/(N_{A0}+N_{B0})$ , sukladno modelu radi se o trokomponentnoj smjesi s molarnim udjelima  $x_A = N_{A0}/(N_{A0}+N_B+N_{B2})$ ,  $x_B = N_B/(N_{A0}+N_B+N_{B2})$  i  $x_{B2} = N_{B2}/(N_{A0}+N_B+N_{B2})$  u kojoj prema zakonu o očuvanju mase vrijedi i  $N_{B0} = N_B + 2N_{B2}$ .

Dalje se pretpostavlja da se pretpostavljena trokomponentna smjesa vlada kao idealna otopina te da su opažene neidealnosti rezultat jedino toga što se otopina makroskopski promatra kao dvokomponentna smjesa.

Treba izvesti izraze za prividni koeficijent aktivnosti dvokomponentne otopine koji proizlaze iz opisanoga modela. Konačni izrazi glase:

$$\gamma_A = 2k/\delta$$

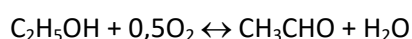
$$\gamma_B = (2/x_B)[-x_A + (x_A^2 + 2kx_Ax_B + kx_B^2)^{0,5}]/\delta$$

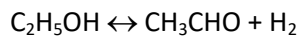
$$\delta = (2k-1)x_A + kx_B + (x_A^2 + 2kx_Ax_B + kx_B^2)^{0,5}$$

$$k = 4K+1$$

$K$  je ravnotežna konstanta dimerizacije. (Sandler)

**A-14.** Acetaldehid se proizvodi oksidacijom etanola prema sljedećim reakcijama u plinskoj fazi\_

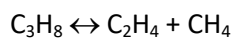
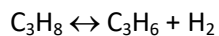




Reakcije se provode pri 540°C i 1 bar prevođenjem smjese preko srebrene mrežice, uz zrak kao oksidans.

Treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese pri provođenju reakcije uz 50 %-tni stehiometrijski suvišak zraka. (Sandler)

**A-15.** Kada se propan zagrijava do visokih temperatura dolazi do njegove pirolize ili razgradnje. Pretpostavit će se da se odvijaju samo dvije reakcije:

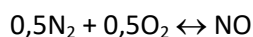


te da se te reakcije odvijaju u plinskoj fazi.

a) treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese pri 1 bar u temperaturnom području od 1000 do 2000 K

b) treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese u temperaturnom području od 1000 do 2000 K uz primjenu reaktorske „bombe“ stalnoga volumena koja se puni propanom pri 25°C i 1 bar. (Sandler)

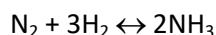
**A-16.** U kemijski se reaktor pri 3000 K i 1 bar kontinuirano dovode jednake količine čistoga dušika i kisika, a iz njega se kontinuirano odvodi ravnotežna reakcijska smjesa. Reakcija je:



Uz pretpostavku adijabatskoga reaktora treba odrediti sastav reakcijske smjese i temperaturu. (Sandler)

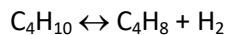
**A-17.** Prema Le Chatelierovu načelu očekuje se da će povećanje koncentracije reaktanata potaknuti reakciju koja će taj reaktant potrošiti. No, to nije uvijek točno.

Treba pokazati da će za reakciju:

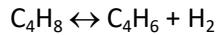


povećanje koncentracije dušika za mali iznos pri stalnome tlaku i temperaturi potaknuti proizvodnju veće količine amonijaka ako je molarni udio dušika manji od 0,5, dok će isto to povećanje ako je molarni udio dušika veći od 0,5 potaknuti disocijaciju amonijaka prema reaktantima. Zašto se to događa? (Sandler)

**A-18.** 1-buten proizvodi se katalitičkim dehidrogeniranjem iz *n*-butana:



No, i 1-buten može se dehidrogenirati pri čemu nastaje 1,3-butadien:



Treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese pri tim dvjema dehidrogenacijama pri 1 bar i

a) 900 K

b) 1000 K. (Sandler)

**A-19.** Poznaje li se sastav i ulazna temperatura goriva te sastav i ulazna temperatura oksidacijskoga sredstva, općenito se može izračunati adijabatska temperatura plamena baklje ili plamenika, uz pretpostavku zanemarivanja toplinskih gubitaka radijacijom.

Treba izračunati temperaturu plamena i izlazni sastav reakcijske smjese pri spaljivanju vodika ako se:

a) kao oksidacijsko sredstvo upotrebljava čisti kisik u stehiometrijskom omjeru

b) kao oksidacijsko sredstvo upotrebljava čisti kisik u 100 %-tnom suvišku

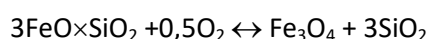
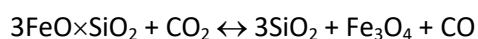
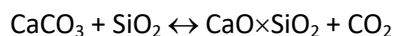
c) kao oksidacijsko sredstvo upotrebljava zrak u dvostrukoj količini od stehiometrijski potrebne.

U svim slučajevima podrazumijeva se da vodik i oksidacijsko sredstvo u baklju ulaze pri 298,15 K i 1 atm. (Sandler)

**A-20.** Sovjetska sonda Venera VII dosegla je istoimeni planet 15. prosinca 1970. i izmjerila uvjete na njegovoj površini:  $T = 747 \pm 20$  K,  $p = 90 \pm 15$  atm.

Inteferometrijska su mjerenja pokazala da temperatura na površini planeta varira u rasponu od tek 10 do 20 K u odnosu na srednju i da najhladnije područje leži uz ekvator. Nadalje, radarska astronomska mjerenja utvrdila su da dielektrična konstanta površine Venere upućuju na to da se sastoji od silikatnih minerala. Nadalje, spektroskopska istraživanja dala su i približan sastav Venerine atmosfere: ugljikova je dioksida nešto manje od 99,9 %, vode je 0,01 %, ugljikova monoksida je 0,01 %, klorovodika ima oko 0,1%, fluorovodika  $1 \times 10^{-6}$  %, kisika ima u tragovima, a sumporovih spojeva ( $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{COS}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{SO}_3$ ) nema.

Budući da je temperatura Venere tako visoka, a planet je prilično star, može se pretpostaviti da u kemijske reakcije između planeta i njegove atmosfere dovele do kemijske ravnoteže. Razmataju se sljedeće reakcije:



Treba odrediti je li pretpostavka o kemijskoj ravnoteži u suglasju s izmjerenim sastavom atmosfere.

Standardna Gibbsova energija nastajanja  $\text{FeO} \times \text{SiO}_2$  je  $-1,060$  MJ/mol, a njegova standardna entalpija nastajanja je  $-1,144$  MJ/mol. Podatke za druge tvari treba samostalno pronaći. Toplinski kapaciteti krutina slijede polinomnu ovisnost:

$$c_p / [\text{J}/(\text{mol K})] = a + b(T/\text{K}) + e/(T/\text{K})^2$$

Parametri su u tablici:

| Komponenta                       | $a$    | $b \times 10^2$ | $e \times 10^{-4}$ |
|----------------------------------|--------|-----------------|--------------------|
| $\text{CaO} \times \text{SiO}_2$ | 116,94 | 0,8602          | -3,120             |
| $\text{CaCO}_3$                  | 82,34  | 4,975           | -1,287             |
| $\text{Fe}_3\text{O}_4$          | 172,26 | 7,874           | -4,098             |
| $\text{FeO} \times \text{SiO}_2$ | 98,28  | 4,269           | -1,215             |
| $\text{SiO}_2$                   | 45,48  | 3,645           | -1,009             |

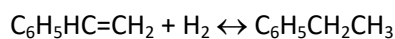
Pretpostavlja se da se plinska faza vlada idealno. (Sandler)

**A-21.** Stiren se može hidrogenirati do etilbenzena pri umjerenim uvjetima u kapljevitij i u plinskoj fazi. Treba izračunati ravnotežne udjele vodika, stirena i etilbenzena u parnoj i kapljevitij fazi pri sljedećim uvjetima:

a)  $p = 3$  bar,  $T = 25^\circ\text{C}$ , početni molarni omjer vodika prema stirenu je 2:1

b)  $p = 3$  bar,  $T = 150^\circ\text{C}$ , početni molarni omjer vodika prema stirenu je 2:1

Jednadžba reakcije je:



Parametri topljivosti stirena, etilbenzena i vodika su 9,3; 10,1 i 3,25 ( $\text{cal}/\text{cm}^3$ )<sup>0,5</sup>, molarni volumeni kapljevine su 116; 123 i 3,1  $\text{cm}^3/\text{mol}$ .

Standardne Gibbsove energije i entalpije nastajanja, temperaturnu ovisnost toplinskih kapaciteta i ravnotežne tlakove para treba pronaći u dostupnoj literaturi. (Sandler)

**A-22.** Zagrijava li se 1 mol plina u sustavu stalna volumena i mjeri se toplinski tok i temperatura plina kao funkcija vremena, može se izračunati toplinski kapacitet pri stalnome volumenu iz:

$$c_v = (\partial U / \partial T)_v = (dQ/dt) / (\partial T / \partial t)_v$$

Jednadžba se također može primijeniti za izračunavanje djelatnoga toplinskoga kapaciteta  $c_{v,\text{eff}}$  plina u kojem se odvija kemijska reakcija, npr. pri disocijaciji dušikova tetroksida u dušikov dioksid:

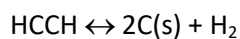
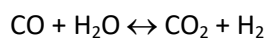
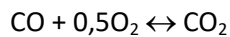
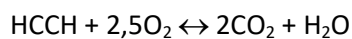
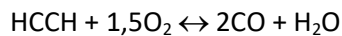


U tim slučajevima  $c_{v,eff}$  plina može biti mnogo veći nego toplinski kapacitet plina u kojem se ne odvija kemijska reakcija.

a) Treba izvesti izraz za  $c_{v,eff}$  dušikova tetroksida koji disocira i komentirati ovisnost  $c_{v,eff}$  o unutrašnjoj energiji kemijske reakcije

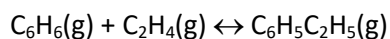
b) Treba izračunati djelatni molarni toplinski kapacitet dušikova tetroksida pri stalnome volumenu u ovisnosti o temperaturi u području od 300 do 600 K, ukoliko se u reaktor stalnoga volumena dozira čisti  $N_2O_4$  pri 300 K i 1 atm. (Sandler)

**A-23.** Treba izračunati temperaturu plamena acetilenskoga plamenika u kojem se čisti acetilen spaljuje kisikom u količini dvostruko većoj od stehiometrijske. I kisik i acetilen doziraju se pri sobnoj temperaturi i atmosferskome tlaku. Reakcije su:



(Sandler)

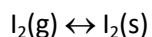
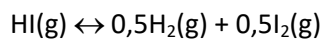
**A-24.** U reaktor stalnoga volumena dozira se 1 mol etanola i 1 mol benzena i zagrijava na 600 K. Po dodatku katalizatora oblikuje se ravnotežna smjesa etilbenzena, benzena i etilena:



Tlak u reaktoru prije dodatka katalizatora bio je 1 atm.

Treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese i toplinu koju treba odvesti da bi se održala stalna temperatura od 600 K. (Sandler)

**A-25.** Pri injektiranju plinovitoga jodovodika u valjkasti reaktor pod vakuumom može doći do sljedećih reakcija:

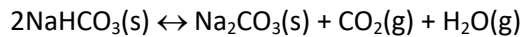


(Budući da se Gibbsove energije nastajanja joda daju i za plinovitu i za krutu fazu, praktičnije je faznu ravnotežu krutina-plin promatrati kao kemijsku ravnotežu.) Pri izotermnoj kompresiji reakcijske smjese pri 25°C dolazi se do tlaka kad se pojavljuje prvi kristalić joda.

Treba odrediti taj tlak i sastav parne faze pri tome tlaku. (Sandler)



**A-26.** Kalciniranje sode bikarbone odvija se reakcijom:



Kada se ta reakcija provela u laboratoriju, u valjkastome reaktoru pod vakuumom, izmjeren je ravnotežni tlak od 0,826 kPa pri 30°C i 166,97 kPa pri 110°C. Može se pretpostaviti da entalpija kalciniranja ne ovisi o temperaturi.

a) treba izračunati reakcijsku entalpiju

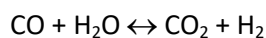
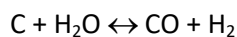
b) treba izvesti izraz za ovisnost ravnotežne konstante o temperaturi

c) treba odrediti tlak pri kojem će parcijalni tlak ugljikova dioksida u reaktoru iznositi točno 1 bar. (Sandler)

**A-27.** Tijekom katalitičkoga cijepanja (kreking) ugljikovodika dolazi do taloženja ugljika na sloju katalizatora. Da bi se uklonio ugljik i katalizator održao u reduciranom obliku, povremeno se preko sloja protjeruje čisti vodik. Eksperimenti su pokazali da se reakcijska smjesa pri 1000 K i 1 bar sastoji od 10 % metana i 90 % vodika.

Treba izračunati odgovara li ta konverzija ravnotežnoj i je li reakcija termodinamički ograničena. Može li se viša koncentracija metana postići smanjenjem protoka vodika kroz reaktor kako bi se uz zadanu količinu vodika uklonilo više ugljika? (Sandler)

**A-28.** Ekvimolarna plinska smjesa ugljikova dioksida i vodika „reformira“ se prevođenjem preko katalizatora. Tlak u reformeru ograničen je mogućnošću taloženja ugljika kao krutine. Iako su moguće brojne reakcije, vjeruje se da se odvijaju sljedeće:

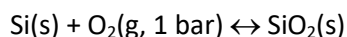
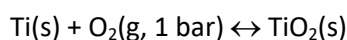


a) Treba izračunati u kojem će području tlakova doći do taloženja ugljika pri temperaturama između 600 i 1000 K ako se reakcijska smjesa nalazi u ravnotežnom stanju.

b) Treba izračunati pri kojem će se tlaku točno 30 % ugljika istaložiti iz zadane plinske smjese u obliku krutine za svaku temperaturu u području od 600 do 1000 K. (Sandler)

**A-29.** Razvija se proces proizvodnje ultračistoga titanija. U dijelu procesa titanij će se nalaziti u kvarcnome ( $\text{SiO}_2$ ) lončiću pri 1273 K. Kemijski se inženjer brine hoće li titanij reducirati silicijev dioksid do elementarnog silicija uz nastanak titanijeva dioksida što bi smanjilo čistoću titanija.

Treba odrediti je li ta briga opravdana. Pri 1273 K reakcijske Gibbsove energije reakcija:



iznose  $-674 \text{ kJ/mol}$  i  $-644 \text{ kJ/mol}$ . (Sandler)

**A-30.** Kako biste odredili reakcijsku entropiju i entalpiju za reakciju koja se provodi u elektrokemijskoj ćeliji? (Sandler)

**A-31.** Pri  $452,2 \text{ K}$  i ukupnom tlaku od  $95,9 \text{ kPa}$  te uz prikladan katalizator ravnotežni doseg disocijacije izopropanola na aceton i vodik iznosi  $56,4 \%$ . Iz te informacije treba izračunati standardnu Gibbsovu reakcijsku energiju pri naznačenoj temperaturi. (Sandler)

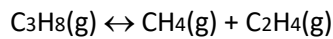
**A-32.** Katalitičkim hidrogeniranjem kapljevitoga benzena može se dobiti, između ostaloga, cikloheksen, cikloheksan i 1,3-cikloheksadien. Treba izračunati ravnotežnu raspodjelu produkata pri  $1 \text{ bar}$  i  $298,15 \text{ K}$  kao funkciju utroška vodika, uz pretpostavku da plinovita faza sadrži samo vodik. (Sandler)

**A-33.** Bubrezi, između ostalog, služe za prijenos korisnih spojeva iz urina u krv i toksina iz krvi u urin. Pri prijenosu glukoze iz urina u krv bubrezi prenose glukozu u smjeru suprotnom od koncentracijskoga gradijenta, tj. iz otopine niže u otopinu više koncentracije. To je moguće samo zato što se prijenos tvari odvija uz kemijsku reakciju, što se naziva „aktivnim prijenosom“. Treba izračunati minimalni rad prijenosa (ili potrebnu Gibbsovu energiju) za prijenos glukoze iz urina u krv ako je koncentracija glukoze u urinu na ulazu u bubreg  $5 \times 10^{-5} \text{ mol/kg}$ , a na izlazu iz bubrega  $5 \times 10^{-6} \text{ mol/kg}$ , a koncentracija glukoze u krvi je približno stalna i iznosi  $5 \times 10^{-3} \text{ mol/kg}$ . (Sandler)

**A-34.** U jednoj jednolitrenoj čaši nalazi se otopina bakrova sulfata u vodi koncentracije  $0,0001 \text{ M}$ , a u drugoj koncentracije  $0,01 \text{ M}$ . Treba izračunati maksimalni rad koji se može dobiti pri  $25^\circ\text{C}$  iz elektrokemijske ćelije koja upotrebljava te dvije otopine kao elektrolite. (Sandler)

**A-36.** Treba odrediti maksimalni rad koji se može dobiti sagorijevanjem benzina (*n*-oktana,  $\text{C}_8\text{H}_{18}$ ) u automobilskome motoru. Treba pretpostaviti da u motor pri  $1 \text{ bar}$  i  $25^\circ\text{C}$  ulazi stehiometrijska smjesa para *n*-oktana i zraka, reakcija sagorijevanja je potpuna, a otpadni plinovi izlaze iz motora pri  $1 \text{ bar}$  i  $150^\circ\text{C}$ . (Sandler)

**A-37.** Dugolančani će se alkan na prikladnoj temperaturi cijepati na manji alkan i alken. Primjer takvog cijepanja je reakcija u kojoj se propan cijepa na metan i etilen:

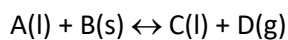


a) treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese pri 298,15 K i ukupnom tlaku od 1 bar ako reakcija kreće od čistoga propana

b) treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese pri 650 K i ukupnom tlaku od 1 bar ako reakcija kreće od čistoga propana

c) treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese pri 650 K i ukupnom tlaku od 10 bar ako reakcija kreće od čistoga propana; pretpostavlja se idealno vladanje plinske smjese. (Sandler)

**A-38.** Jednadžba hipotetske reakcije glasi:



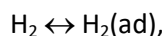
gdje l, s i g označavaju kapljevinu, krutinu i plin. Svaka se tvar pojavljuje samo u naznačenoj fazi. Standardna Gibbsova reakcijska energija iznosi  $-2,4$  kJ/mol (po molu komponente A) pri  $25^\circ\text{C}$  za sve tvari u odgovarajućim agregatnim stanjima.

a) Treba odrediti ravnotežne količine i sastave za slučaj kada tvari A i C tvore idealnu kapljevitu smjesu, tvar B nalazi se u suvišku i parcijalni tlak tvari D održava se pri tlaku od 0,5 bar.

b) Treba ponoviti proračun iz točke a) za slučaj kada tvari A i C tvore neidealnu kapljevitu smjesu a ekscesna se Gibbsova energija može izračunati izrazom  $g^{\text{ex}}/(RT) = 0,3x_Ax_C$

c) Treba izračunati ravnotežne količine i sastave za slučaj kada se reakcija provodi u reaktoru stalnoga volumena (bombi) od 4 L koja je u početku reakcije evakuirana, a puni se jednim molom komponente A i dvostrukom stehiometrijskom količinom komponente B; kapljevita se otopina smatra idealnom (treba zanemariti volumen kapljevine i pare i pretpostaviti stalnu temperaturu od  $25^\circ\text{C}$ . (Sandler)

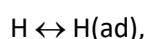
**A-39.** Vodik i drugi plinovi mogu nakon adsorpcije na čvrstu površinu disociirati, a pri katalitičkim je reakcijama važno poznavati dolazi li do takve disocijacije. Ukoliko nema disocijacije, adsorpcija se može opisati izrazom:



a količina adsorbiranoga vodika može se izračunati prema:

$$n(\text{H}_2, \text{ad}) = K_1 a_{\text{H}_2}$$

gdje je  $a_{\text{H}_2}$  aktivnost molekuskoga vodika u plinskoj fazi. No, ukoliko dolazi do disocijacije vodika, proces se odvija u dva stupnja:



pa vrijedi:

$$n(\text{H}_2, \text{ad}) = 0,5n(\text{H}, \text{ad}) = 0,5K_3a_{\text{H}}$$

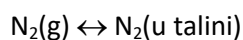
Ako je  $K_2$  ravnotežna konstanta disocijacijske reakcije, treba izvesti izraze za adsorbiranu količinu molekulskoga vodika kao funkciju ravnotežnih konstanti i parcijalnoga tlaka vodika za dva slučaja (adsorpcija bez disocijacije i adsorpcija uz disocijaciju). Kako biste odredili o kojem se procesu radi ako imate podatke o količini adsorbiranoga vodika kao funkciju ravnotežnoga tlaka? (Sandler)

**A-40.** Neosigurani spremnik sadrži 20 kg *n*-butana pri svome ravnotežnome tlaku koji odgovara temperaturi od 25°C. Prilikom pada cilindra dolazi do loma ventila, ispušta se cijeli sadržaj spremnika, nastali oblak pare dolazi u dodir s izvorom zapaljenja i eksplodira. Procijenite oslobođenu energiju? (Sandler)

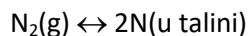
**A-41.** Plinovi se (vrlo slabo) otapaju u rastaljenim metalima. Primjerice, topljivost dušika u željeznoj talini može se opisati empirijskim izrazom:

$$\text{mas. \% N}_2 = 0,045 (p_{\text{N}_2}/\text{bar})^{0,5}$$

Pitanje je odvija li se otapanje bez disocijacije:



ili uz disocijaciju:

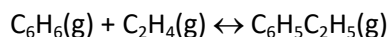


Na osnovi empirijskoga izraza zaključite o kakvom se mehanizmu radi. Pretpostavite da zbog niske koncentracije otopljenoga dušika topljivost slijedi Henryjev zakon s odgovarajućim koeficijentom aktivnosti jednakim 1. (Sandler)

**A-43.** Treba procijeniti maksimalan rad koji se može dobiti kontroliranim spaljivanjem metana u zraku pri 1 bar kao funkcijom omjera metan/zrak. Prvo treba izračunati adijabatsku temperaturu plamena. Zatim Carnotovim kružnim procesom toplina oduzima produktima sagorijevanja pri čemu se oni hlade do 25°C. Pripazite, toplina se ne oduzima pri adijabatskoj temperaturi plamena, nego pri temperaturnom rasponu koji seže od adijabatske temperature do konačne temperature od 25°C. (Sandler)

**A-44.** Treba usporediti rad dobiven u prethodnome zadatku s radom koji bi se mogao dobiti istom reakcijom kada pretvorba ne bi uključivala toplinski proces, primjerice spaljivanjem u gorivnome članku.

**A-47.** U izobarni reaktor (1 bar) dozira se 1 mol etanola i 1 mol benzena i zagrijava na 600 K. Po dodatku katalizatora oblikuje se ravnotežna smjesa etilbenzena, benzena i etilena:



Treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese i toplinu koju treba odvesti da bi se održala stalna temperatura od 600 K. (Sandler)

**A-48.** Kemijska reakcija disocijacije dušikova tetroksida je:



Odgovarajuća ovisnost reakcijske Gibbsove energije o temperaturi u ograničenome temperaturnome području i pri 1 bar iznosi:

$$G_r(T)/(\text{kJ/mol}) = 57,33 - 0,17677 (T/\text{K}).$$

- Treba odrediti reakcijsku entalpiju za disocijaciju dušikova tetroksida
- Treba odrediti ravnotežni sastav smjese pri 50°C te 0,1, 1 i 10 bar
- Treba odrediti ravnotežni sastav smjese pri 200°C te 0,1, 1 i 10 bar (Sandler)

**A-49.** Vrlo polarne molekule mogu asociirati u plinskoj fazi. Primjer je octena kiselina koja, zbog svoje strukture, može tvoriti samo dimere ali ne i polimere. Reakcija glasi:

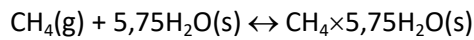


Standardna reakcijska entalpija (1 bar, 298,15 K) je  $-58,62 \text{ kJ/mol}$ , a standardna reakcijska entropija  $-138,2 \text{ K}(\text{mol K})$ . Za potrebe zadatka smatra se da ne ovise o temperaturi.

- Treba izračunati stupanj dimerizacije octene kiseline pri 25°C te pri 0,1, 1 i 10 bar
- Treba izračunati stupanj dimerizacije octene kiseline pri 100°C te pri 0,1, 1 i 10 bar
- Pretpostavi li se da je octena kiselina monomer, octena se kiselina ne vlada kao idealni plin. Međutim, može se pretpostaviti da pri tlakovima i temperaturama iz točaka a) i b) monomer i dimer tvore plinsku smjesu koja se vlada kao idealni plin. Privedna neidealnost stoga je posljedica samo promjene brojnosti čestica kao posljedice dimerizacije. Treba izvesti jednadžbu stanja za octenu kiselinu koja uzima u obzir tu dimerizaciju, ali se kao varijable pojavljuju tlak, volumen i množina octene kiseline – monomera kao nezavisne varijable. (Sandler)

**A-50.** Pri niskim temperaturama smjesa vode i metana može oblikovati hidrat, krutinu koja sadrži zarobljeni metan. Nastajanje hidrata ima pozitivne i negativne strane. Primjerice, hidrati su mogući veliki izvor podzemnoga metana u arktičkim i antarktičkim područjima koji može poslužiti kao budući

izvor energije. No, u hladnim područjima, na sjeveru Aljaske ili u Sjevernome moru hidrati mogu nastajati i u cjevovodima i blokirati protjecanje prirodnoga plina. Približna reakcija nastajanja hidrata jest:



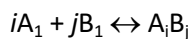
Ravnotežni parcijalni tlakovi metana pri nastajanju hidrata približno iznose 2,0 i 1,5 MPa a pri 267 i 255 K. Uzet će se da je standardno stanje metana za ovu reakciju čisti plinoviti metan pri 1 bar, dok se za voda i hidrat kao standardno stanje uzimaju odgovarajuće čiste krutine.

a) Treba izračunati Gibbsovu reakcijsku energiju za nastajanje hidrata pri 267 K i 255 K

b) Uz pretpostavku da reakcijska entalpija i entropija ne ovise o temperaturi, treba izračunati njihove vrijednosti

c) Na osnovi raspoloživih informacija treba izračunati ravnotežni tlak metana pri nastajanju hidrata pri 273 K. (Sandler)

**A-51.** Dvije čestice mogu asociirati u plinskoj fazi prema reakcijama:



U prethodnim izrazima može postojati i maksimalni stupanj asocijacije. Neka su  $\bar{g}_A$  i  $\bar{g}_B$  parcijalne molarne Gibbsove energije tvari A i B (u svim svojim oblicima, asociiranim i neasociiranim). Treba dokazati da vrijedi:

$$\bar{g}_A = \bar{g}_{A1}$$

$$\bar{g}_B = \bar{g}_{B1}$$

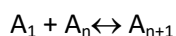
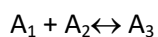
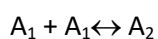
gdje su  $\bar{g}_{A1}$  i  $\bar{g}_{B1}$  parcijalne molarne Gibbsove energije tvari A i B u monomernome obliku. Također, treba dokazati da slično vrijedi i za parcijalne fugacitivnosti:

$$f_A = f_{A1}$$

$$f_B = f_{B1}$$

(Sandler)

**A-52** Teško je opisati komponente koje asociiraju ili se vežu vodikovim vezama. Jedan od načina njihova opisa je model kontinuirane asocijacije (bez ograničenja maksimalnoga stupnja asocijacije):



Pretpostavit će se da se fluid koji asociira može opisati van der Waalsovom jednadžbom. Parametri za  $j$ -mer su:

$$a_j = j^2 a_1$$

$$b_j = j b_1.$$

Nadalje, smatrat će se da ravnotežna konstanta za asocijaciju:

$$K_{j+1} = a_{j+1}/(a_j a_1)$$

ne ovisi o stupnju asocijacije, tj. da vrijedi:

$$K_2 = K_3 = \dots = K_n = K$$

Neka je  $N_0$  ukupna množina tvari bez asocijacije, a  $N_T$  je ukupna množina tvari uz asocijaciju. Binarni interakcijski parametri bit će jednaki nuli jer su čestice jako slične.

a) Treba odrediti izraze za  $a$  i  $b$  smjese iskazane preko  $a$ ,  $b$ ,  $N_0$  i  $N_T$

b) Treba pokazati da omjer  $P\varphi_j\varphi_1/\varphi_{j+1}$  ne ovisi o indeksu  $j$  i dobiti izraz za taj omjer ( $\varphi_j$  označava parcijalni koeficijent fugacitivnosti čestice  $j$ )

c) Treba dobiti izraz za jednadžbu stanja asociirajućega fluida koja kao nezavisne varijable uzima samo  $p$ ,  $v$ ,  $T$ ,  $N_0$  te parametre  $a_1$ ,  $b_1$  i ravnotežnu konstantu  $K$ . (Treba provjeriti svodi li se tak izraz na van der Waalsovu jednadžbu stanja) za jednokomponentni fluid koji ne asociira u graničnome slučaju  $K \rightarrow 0$ ) (Sandler)

**A-53** Fluorovodik je čudan svat! Evo tablice kritičnih svojstava vodikovih halida:

|     | $M$   | $T_K$ (K) | $p_K$ (bar) | $z_K$ | $\omega$ |
|-----|-------|-----------|-------------|-------|----------|
| HF  | 20    | 461,0     | 64,88       | 0,12  | 0,372    |
| HCl | 36,46 | 324,6     | 83,07       | 0,249 | 0,12     |
| HBr | 80,91 | 363,1     | 85,50       | 0,283 | 0,063    |
| HI  | 127,9 | 424,0     | 83,07       | 0,309 | 0,05     |

HF ima neočekivano visoku kritičnu temperaturu i Pitzerov koeficijent acentričnosti u usporedbi s relativnom molekulskom masom. Ima i najniži kritični koeficijent kompresibilnosti od svih poznatih tvari.

Evo i eksperimentalnih podataka o ravnotežnome tlaku para i prividne relativne molekulske mase ravnotežne pare fluorovodika:

| $T$   | $p^\circ$ (bar) | $M_{app}$ |
|-------|-----------------|-----------|
| 227,3 | 0,0519          | 92,8      |
| 243,9 | 0,1265          | 85,0      |
| 256,4 | 0,2328          | 79,4      |
| 277,8 | 0,5780          | 69,8      |

303,0 1,4353 58,4  
322,6 2,6178 50,3

Evo i prividne relativne molekulske mase pri stalnome tlaku od 0,993 bar kao funkcija temperature dana:

|              | $T(K)$ | $M_{app}$ |
|--------------|--------|-----------|
| (izračunato) | 227,3  | 117,6     |
|              | 250,0  | 110,7     |
|              | 270,3  | 95,7      |
|              | 285,7  | 74,6      |
| (izmjereno)  | 294,1  | 59,8      |
|              | 303,0  | 43,0      |
|              | 312,5  | 28,8      |
|              | 322,6  | 21,8      |

Prividna relativna molekulska masa određena je mjerenjem gustoće plina i njenim uspoređivanjem s gustoćom idealnoga plina relativne molekulske mase 20.

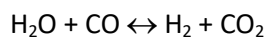
Jedno moguće tumačenje je asocijacija molekula HF sukladno jednadžbama:



Opišite kako biste upotrijebili prikazane podatke i razvili model za HF s ciljem određivanja ravnoteže para-kapljevina u sustavu koji uz HF sadržava komponentu koja ne asocira. (Sandler)

### B-1

Ekvimolarna smjesa  $\text{H}_2$  i  $\text{CO}$  proizvodi se reakcijom ugljena i vodene pare. Smjesa se naziva vodenim plinom. Da se poveća udio vodika, vodena se para miješa s vodenim plinom i prevodi preko katalizatora pri  $550^\circ\text{C}$  i 1 bar kako bi se  $\text{CO}$  preveo u  $\text{CO}_2$  reakcijom:



Nereagirana voda kondenzira se, a  $\text{CO}_2$  se apsorbira pa u produktu ostaje pretežito vodik. Reakcija se na engleskom jeziku naziva *water gas shift* (pomak vodenoga plina). Treba izračunati ravnotežne sastave pri  $550^\circ\text{C}$  za ekvimolarnu pojnu plinsku smjesu vodika, ugljikova monoksida i vodene pare.

Podaci za Gibbsove energije nastajanja pri  $550^\circ\text{C}$  su:

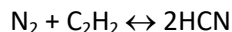
|                      | $G_f^\circ$ (kJ/mol) | $H_f^\circ$ (kJ/mol) |
|----------------------|----------------------|----------------------|
| $\text{H}_2\text{O}$ | -202,35              | -246,60              |
| $\text{CO}$          | -184,47              | -110,83              |
| $\text{CO}_2$        | -395,56              | -294,26              |

(Elliot i Lira)



## B-2

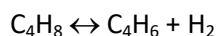
Cijanovodik se može proizvesti nitrogeniranjem acetilena u plinskoj fazi prema reakciji:



Pojna smjesa sadrži plinoviti dušik i aceten u stehiometrijskom omjeru. Temperatura se održava pri 300°C. Odredite ravnotežni sastav produkta pri 1 i 200 bar. Gibbsova reakcijska energija pri 300°C iznosi 30,08 kJ/mol. (Elliot i Lira)

## B-3

Butadien se proizvodi katalitičkim dehidrogeniranjem 1-butena u plinskoj fazi:



Da bi se potisnule sporedne reakcije, buten se razrjeđuje vodenom parom prije ulaska u reaktor.

a) Treba procijeniti radnu temperaturu reaktora da bi se pri tlaku od 2 bara postigla 30 %-tna konverzija 1-butena u 1,3-butadien, ako omjer vodene pare i 1-butena u pojnoj smjesi iznosi 12:1.

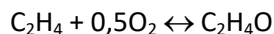
b) Treba odrediti kako će promjena omjera vodene pare i 1-butena u pojnoj smjesi na 1:1 utjecati na ravnotežnu temperaturu reakcije.

| $G_f^\circ$ (kJ/mol) | 600 K  | 700 K  | 800 K  | 900 K  |
|----------------------|--------|--------|--------|--------|
| 1,3-butadien         | 195,73 | 211,71 | 227,94 | 244,35 |
| 1-buten              | 150,92 | 178,78 | 206,89 | 235,35 |
| $G_r^\circ$          | 44,81  | 32,93  | 21,05  | 9,00   |

(Elliot i Lira)

## B-4

Etilen-oksidi je važan organski intermedijer kemijske industrije. Standardna Gibbsova reakcijska energija pri 298 K za reakciju:



iznosi -79,79 kJ/mol. Tako velika negativna vrijednost standardne Gibbsove reakcijske energije upućuje na to da je ravnoteža pri 298 K pomaknuta sasvim udesno. No, izravna se oksidacija etilena mora potaknuti selektivnim katalizatorom kako bi se spriječilo potupno sagorijevanje do ugljikova dioksida i vode. Čak i uz katalizator, reakcija se mora provoditi pri 550 K da bi se odvijala prihvatljivom brzinom. Kako je reakcija egzotermna, povišenje temperature negativno će utjecati na ravnotežu. Je li reakcija uopće izvediva (s ravnotežnoga gledišta) pri 550 K, uz pretpostavku da postoji selektivni

katalizator? Toplinski kapaciteti tvari u promatranome temperaturnom području mogu se iskazati izrazima:

etilen oksid  $c_p/[J/(mol\ K)] = 6,57+0,1389(T/K)$   
etilen  $c_p/[J/(mol\ K)] = 15,40+0,0937(T/K)$   
kisik  $c_p/[J/(mol\ K)] = 26,65+0,0084(T/K)$

(Elliot i Lira)

### B-5

Reakcija pomaka vodenoga plina provodi se pri definiranome tlaku i temperaturi s pojnom smjesom koja sadrži samo ugljikov monoksid i vodenu paru. Pokažite da se maksimalni ravnotežni molarni udio vodika u produktu postiže kada se reaktanti nalaze u stehiometrijskome omjeru! Pretpostavite idealno vladanje plinske smjese!

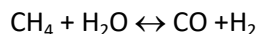
(Elliot i Lira)

### B-6

Uz pretpostavku idealnoga vladanja plinske smjese, procijenite ravnotežni sastav plinske smjese triju izomera pentana pri 400 K i 1 bar. Gibbsove energije nastajanja izomera pri 400 K iznose 40,17, 34,31 i 37,61 kJ/mol za *n*-pentan, izopentan i neopentan. (Elliot i Lira)

### B-7

Jedan od postupaka za proizvodnju sintetskoga plina počiva na katalitičkoj reakciji metana i vodene pare prema:



Uz tu se reakciju paralelno odvija jedino još i pomak vodenoga plina ( $\text{H}_2\text{O} + \text{CO} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{CO}_2$ )

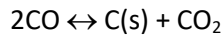
Gibbsove energije i entalpije nastajanja prikazane su tablično:

| a                | $H_f^\circ$ (600 K) | $H_f^\circ$ (1300 K) | $G_f^\circ$ (600 K) | $H_f^\circ$ (1300 K) |
|------------------|---------------------|----------------------|---------------------|----------------------|
| CH <sub>4</sub>  | -83,22              | -91,71               | -22,77              | 52,30                |
| H <sub>2</sub> O | -244,72             | -249,45              | -214,01             | -175,81              |
| CO               | -110,16             | -113,85              | -164,68             | -226,94              |
| CO <sub>2</sub>  | -393,80             | -395,22              | -395,14             | -396,14              |

Treba izračunati ravnotežne sastave reakcijske smjese za pojnu smjesu metana i vodene pare u omjeru 1:1 pri 600 i 1300 K te pri 1 i 100 bar. (Elliot i Lira)

### B-8

Treba odrediti postoji li mogućnost taloženja ugljika pri 550°C i 1 bar reakcijom:



(Elliot i Lira)

### B-9

Treba izračunati ravnotežnu konverziju etilen-oksida u etilen-glikol pri 298 K i 1 bar za molarni omjer etilen-oksida i vode od 3:1 u pojnoj smjesi:



Standardna Gibbsova reakcijska energija iznosi  $-7824 \text{ J/mol}$ . Za pojednostavljenje proračuna treba pretpostaviti da je plinska faza idealna plinska smjesa, koeficijenti aktivnosti u vodenoj fazi iznose 1, a koeficijenti raspodjele etilen-glikola i etilen oksida mogu se izračunati kao omjer ravnotežnoga i ukupnoga tlaka prema Raoultovu zakonu. (Elliot i Lira)

### B-10

Octena kiselina dimerizira prema:

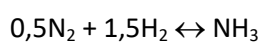


Pretpostavlja se da se asocijacija ne odvija dalje od dimerizacije. Uz pretpostavku da je poznata vrijednost konstante asocijacije octene kiseline u plinskoj fazi,  $K_a$ , te da se smjesa monomera i dimera vlada kao idealni plin, treba izvesti izraz za udio monomera u parnoj fazi,  $y_{A1}$ , kao funkciju tlaka  $p$  i  $K_a$ . Zatim treba razviti izraz za  $pv/(n_0RT)$  kao funkciju  $y_{A1}$  gdje je  $n_0$  prividna množina tvari zanemarujući dimerizaciju. (Naputak: treba napisati  $n_0/n_T$  u ovisnosti o  $y_{A1}$  uz  $n_T = n_1 + n_2$ ). (Elliot i Lira)

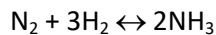
### C-1

Troje studenata FKIT-a, Ante, Mate i Luce, proučavaju reakciju nastajanja amonijaka. Pojna je smjesa stehiometrijskoga sastava pri zadanome tlaku i temperaturi.

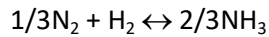
Luce je postavljajući stehiometrijski koeficijent produkta na cijeli broj reakciju zapisala kao:



Mate je zapisao:



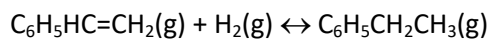
Ante je zapisao:



- a) Treba usporediti iznose standardnih Gibbsovih reakcijskih energija triju studenata
- b) Treba usporediti iznose ravnotežnih konstanti triju studenata
- c) Treba usporediti ravnotežne sastave triju studenata
- d) Treba usporediti ravnotežni doseg reakcije triju studenata (Elliot i Lira)

#### C-4

Reakcija hidrogeniranja stirena je:

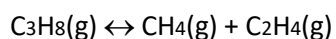


Pojna smjesa sadrži vodik i stiren u molarnome omjeru 3:1. Pretpostavit će se idealno vladanje plinske smjese. Gibbsova reakcijska energija iznosi 213,18 kJ/mol pri 600°C, a reakcijska entalpija pri istoj temperaturi 147,36 kJ/mol.

- a) Treba odrediti ravnotežnu konstantu pri 600°C
- b) Treba odrediti ravnotežni sastav reakcijske smjese pri 600°C i 1 bar
- c) Treba odrediti ravnotežni sastav reakcijske smjese pri 600°C i 2 bar (Elliot i Lira)

#### C-5

Reakcija cijepanja (kreking) propana glasi:

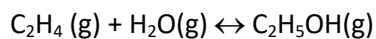


Ravnotežna je konverzija zanemariva pri sobnoj temperaturi, ali postaje znatna pri temperaturama iznad 500 K. Tlak je 1 bar i mogu se zanemariti sve sporedne reakcije.

- a) Treba odrediti temperaturu pri kojoj konverzija doseže 75 % (Naputak: konverziju treba povezati s ravnotežnim dosegom reakcije)
- b) Treba odrediti konverziju pri 600°C za pojnu smjesu propana i dušika (inerta) u omjeru 1:1. Pritom treba pretpostaviti uspostavljanje ravnotežnoga stanja. (Elliot i Lira)

### C-6

Etanol se može proizvesti hidriranjem etilena u parnoj fazi:



Pojna smjesa sadrži 25 % etilena i 75 % vodene pare.

- Treba odrediti ravnotežnu konstantu pri 125°C i 1 bar.
- Ravnotežnu konstantu treba povezati relacijom s ravnotežnim dosegom i izlučiti ravnotežni doseg. (Elliot i Lira)

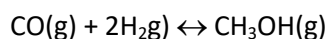
### C-7

Etilen je vrijedna sirovina u mnogim kemijskim procesima. U uvjetima napuštanja industrije zasnovane na fosilnim gorivima, etilen se može proizvesti dehidriranjem etanola, a etanol se i sada masovno proizvodi fermentacijom biomase.

- Treba odrediti koji će postotak čistoga etanola izreagirati pri 150°C i 1 bar pri supostavljanju ravnotežnoga stanja.
- Treba odrediti maksimalnu konverziju etanola pri istim uvjetima uz primjenu pojne smjese od 50 % etanola i 50 % dušika kao inerta. (Elliot i Lira)

### C-8

Katalitička sinteza metanola:



provodi se uvođenjem ekvimolarne smjese pri 200°C u reaktor. Treba izračunati sastav izlazne smjese i izlaznu temperaturu kada se reakcija provodi adijabatski pri 10 bar, a katalizator osigurava postizanje ravnotežne konverzije bez sporednih reakcija. (Elliot i Lira)

### C-9

Plinska smjesa sastava 15% SO<sub>2</sub>, 20% O<sub>2</sub> i 65% N<sub>2</sub> (inert) reagira u katalitičkome reaktoru pri 480°C i 2 bar.

- Treba odrediti ravnotežnu konverziju SO<sub>2</sub> (u SO<sub>3</sub>)
- Treba odrediti toplinu koja se dovodi u reaktor ili iz njega odvodi ako pojna smjesa u reaktor ulazi pri 295 K i 1 bar. (Elliot i Lira)

### C-12

Pri eksplozivnom spaljivanju para pri atmosferskome tlaku, oblak para može se promatrati kao adijabatski sustav jer se reakcija odvija praktički trenutačno, mnogo brže nego izmjena topline. Oblak pare naglo ekspandira uslijed povećanja broja čestica plina pri sagorijevanju, ali i zbog adijabatskoga porasta temperature. Treba procijeniti povećanje volumena  $1 \text{ m}^3$  smjese para propana i stehiometrijske količine kisika pri potpunom sagorijevanju. Početna temperatura plinske smjese je  $22^\circ\text{C}$ . Treba procijeniti i porast temperature. (Elliot i Lira)

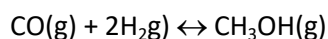
### C-13

a) Treba izvesti izraz za bilancu energije zatvorenoga adijabatskoga sustava stalnoga volumena u kojem se provodi kemijska reakcija u parnoj fazi, uz zanemarivanje energijskih doprinosa uslijed miješanja reaktanata i produkata te pretpostavljajući da se plinska smjesa vlada idealno.

b) U spremnik volumena  $200 \text{ L}$  s propanom pri  $0,09 \text{ MPa}$  prodro je zrak i nastala je stehiometrijska smjesa. Pojavi li se iskra, sustav će izgorjeti takvom brzinom da se proces može smatrati adijabatskim i neće doći do nikakva istjecanja iz spremnika. Treba izračunati tlak i temperaturu u spremniku ako je početna temperatura smjese  $20^\circ\text{C}$ . (Elliot i Lira)

### C-14

Pojna smjesa za sintezu metanola sastoji se od  $75 \%$   $\text{H}_2$ ,  $12 \%$   $\text{CO}$ ,  $8 \%$   $\text{CO}_2$  i  $5 \%$   $\text{N}_2$ . Ravnoteža sljedećih reakcija:



uspostavlja se pri  $550 \text{ K}$  i  $100 \text{ bar}$ .

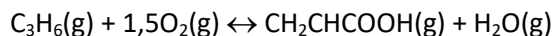
Uz pretpostavku idealnoga vladanja plinske smjese, treba izvesti dvije jednadžbe s dvjema nepoznanicama – ravnotežnim dosezima dviju reakcija, čijim bi se istodobnim rješavanjem odredio ravnotežni sastav plinske smjese. Nakon postavljanja jednadžbi treba numerički odrediti i ravnotežne konstante i na kraju i same ravnotežne dosege. (Elliot i Lira)

### C-15

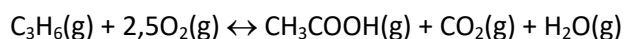
Uz primjenu zeolitnoga katalizatora, termodinamička ravnoteža pri izomerizaciji *n*-butena ( $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_3$ , smjesa *cis*- i *trans*-izomera) uspostavlja se pri  $350^\circ\text{C}$ . Produkti su izobuten [2-metilpropen,  $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)_2$ ] i 1-buten ( $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_3$ ). Željeni je produkt izobuten, kao sirovina za daljnju proizvodnju metil-*t*-butil-etera. Treba odrediti ravnotežni sastav smjese četiriju tvari pri  $1 \text{ bar}$ . (Elliot i Lira)

### C-16

Akrilna se kiselina proizvodi oksidacijom propena u plinskoj fazi:



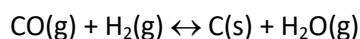
Važna sporedna reakcija je nastajanje octene kiseline:



Reakcije se provode pri 310°C i 4 bar, primjenom katalizatora uz zrak kao oksidacijsko sredstvo. Za apsorpciju reakcijske topline i stabiliziranje temperature reaktora dodaje se i vodena para, u količini od 8 mol po 1 mol propena. Uz 50 %-tni suvišak zraka (u odnosu na glavnu reakciju), treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese. (Elliot i Lira)

### C-17

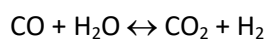
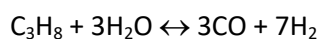
Jedna od sporednih reakcija pri sintezi metanola je taloženje koksa na katalizatoru. U prvoj aproksimaciji promatrat će se samo reakcija:



Treba odrediti radi li se o važnoj reakciji pri 600 K i 100 bar. (Elliot i Lira)

### C-18

Vodik se može proizvoditi reakcijom propana i vodene pare uz nikal kao katalizator:



Zanemarit će se sve druge sporedne reakcije.

a) Treba izračunati ravnotežne konstante pri 700 K i 750 K

b) Treba izračunati ravnotežni sastav reakcijske smjese pri obje temperature ako u reaktor ulazi smjesa propana i vodene pare u omjeru 1:5 (Elliot i Lira)

### C-19

Treba napisati i uravnotežiti reakciju disproporcioniranja ugljikova monoksida uz taloženje koksa (ugljika) i nastajanje plinovitova ugljikova dioksida. Treba odrediti ravnotežnu konstantu reakcije pri 700 i 750 K. Hoće li doći do znatnijega taloženja koksa? (Elliot i Lira)

## C-20

Automobilski su katalizatori osmišljeni i izvedeni tako da umanjuju emisije NO i CO u ispušnim plinovima motora s unutrašnjim sagorijevanjem. Radno područje temperatura im je između 400 i 600°C, a radni tlak iznosi 1 bar. Tipični sastav ispušnoga plina (u dijelovima na milijun, ppm) jest:

|      |      |                |                 |                |                |                  |                              |
|------|------|----------------|-----------------|----------------|----------------|------------------|------------------------------|
| NO   | CO   | O <sub>2</sub> | CO <sub>2</sub> | N <sub>2</sub> | H <sub>2</sub> | H <sub>2</sub> O | CH <sub>4</sub> (kao propan) |
| 1050 | 6800 | 5100           | 135000          | 724000         | 2300           | 125000           | 750                          |

Plinovi sadrže još i NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> i NH<sub>3</sub>. Treba procijeniti sastav izlazne smjese svih komponenata pri 400, 500 i 600°C i nacrtati ovisnost omjera NH<sub>3</sub>/CO kao funkciju temperature. (Elliot i Lira)

## C-22

Etil-*t*-butil-eter (ETBE) nastaje reakcijom *t*-butanola (TBOH) i etanola (EtOH). Reakcija se provodi u kapljevitoj fazi pri 170°C. Tipični sastav pojne smjese u molarnim udjelima je 0,027 (TBOH), 0,832 (EtOH) i 0,141 (H<sub>2</sub>O).

Jedini važan sporedni produkt je izobuten [2-metilpropen, CH<sub>2</sub>=C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]. Uz pretpostavku da se izlazna smjesa nalazi u termodinamičkoj ravnoteži, treba odrediti minimalni tlak pri kojem se mora provoditi reakcija da reakcijska smjesa ostane u potpunosti u kapljevitoj fazi. Hoće li količine izobutena i ETBE ostati unutar granica svojih maksimalnih topljivosti (u smjesi etanola i vode) pri izlaznim uvjetima. [C. Habenicht, L. C. Kam, M. J. Wilschut, M. J. Antal, Jr., Ind. Eng. Chem. Res. 34 (1995) 3784-3792.] (Elliot i Lira)

## C-23

Pri zagrijavanju, vapnenac se raspada na živo vapno i ugljikov dioksid. Treba odrediti pri kojoj će se temperaturi dostići ravnotežni tlak raspada vapnenca od 1 bar. (Elliot i Lira)

## C-24

0,2 g vapnenca smješta se u autoklav volumena 100 cm<sup>3</sup>. Iz autoklava se pri 298 K izvuce sav plin i posuda se zabrtvi. Pri zagrijavanju dolazi do raspada vapnenca:

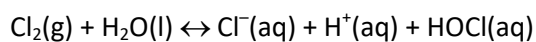


Pri kojoj će temperaturi konverzija vapnenca biti 50 % i koliki će pritom biti ravnotežni tlak. (Elliot i Lira)

## C-25

Pri otapanju klora u vodi dolazi do djelomične hidrolize prema:

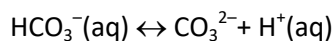
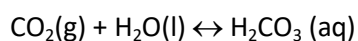
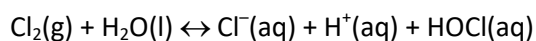




Treba prirediti graf ovisnosti „prividnoga molaliteta“  $\text{Cl}_2$  u otopini kao funkciju parcijalnoga tlaka  $\text{Cl}_2$ . Prividni se molalitet zbroj molaliteta svih klorovih čestica u otopini (pri čemu se  $\text{Cl}_2$  broji dvaput) podijeljen s 2 kako bi se sveo na bazu  $\text{Cl}_2$ . Dijagram treba usporediti s eksperimentalnim podacima. [R. P. Whitney, J. E. Vivian, Ind. Eng. Chem. 33 (1941) 741-744.] (Elliot i Lira)

### C-26

Pri miješanju 0,1 mol  $\text{CO}_2$ , 0,9 mol  $\text{Cl}_2$  i 1 L vode treba procijeniti koncentraciju svih čestica u vodenoj fazi i sastav parne faze pri 0,8 atm. Reakcije su:

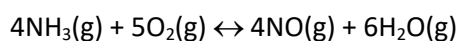


(Elliot i Lira)

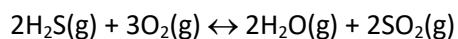
### D-1

Treba izvesti izraze za molarne udjele reakcijskih komponenta kao funkcije dosega reakcije za:

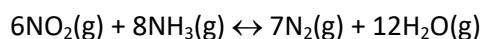
a) sustav koji se inicijalno sastoji od 2 mol  $\text{NH}_3$  i 5 mol  $\text{O}_2$  u reakciji:



b) sustav koji se inicijalno sastoji od 3 mol  $\text{H}_2\text{S}$  i 5 mol  $\text{O}_2$  u reakciji:



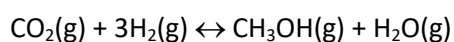
c) sustav koji se inicijalno sastoji od 3 mol  $\text{NO}_2$ , 4 mol  $\text{NH}_3$  i 1 mol  $\text{N}_2$  u reakciji:



(Smith, Van Ness i Abbott)

### D-2

Sustav koji se inicijalno sastoji od 2 mol  $\text{CO}_2$ , 5 mol  $\text{H}_2$  i 1 mol  $\text{CO}$  reagira prema:

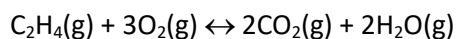
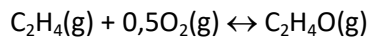




Treba izvesti izraze za molarne udjele reakcijskih komponenta kao funkcije dosega dviju reakcija.  
(Smith, Van Ness i Abbott)

### D-3

Sustav koji se inicijalno sastoji od 2 mol  $\text{C}_2\text{H}_4$  i 3 mol  $\text{O}_2$  reagira prema:



Treba izvesti izraze za molarne udjele reakcijskih komponenta kao funkcije dosega dviju reakcija.  
(Smith, Van Ness i Abbott)

### D-4

Za reakciju pomaka vodenoga plina (*water gas shift*);



Pri visokim temperaturama i niskim do umjerenim tlakovima reakcijske komponente tvore idealnu plinsku smjesu. Ukupna Gibbsova energija sustava jest:

$$g = \sum y_i g_i + RT \sum y_i \ln y_i$$

Ako su Gibbsove energije elemenata u svome standardnom stanju postavljene na vrijednost 0, Gibbsove energije komponenta u reakciji mogu se izjednačiti sa standardnom Gibbsovom energijom nastajanja pa vrijedi:

$$g = \sum y_i g_{f,i}^\circ + RT \sum y_i \ln y_i$$

Promatra li se sustav pri stalnim  $T$  i  $p$ , uvjet ravnoteže može se pisati kao:

$$dG = d(ng) = ndg + gdn = 0$$

ili:

$$n(dg/d\xi) + g(dn/d\xi) = 0$$

Međutim, za reakciju pomaka vodenoga plina  $dn/d\xi = 0$  pa vrijedi:

$$(dg/d\xi) = 0$$

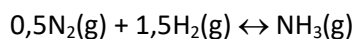
Nakon zamjene molarnih udjela ravnotežnim dosegom treba, za temperaturu od 1000 K, i za pojnu smjesu od 1 mol vodika i 1 mol ugljikova dioksida:

a) odrediti ravnotežni doseg reakcije

b) nacrtati ovisnost  $g$  o  $\xi$  (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-14

Za sintezu amonijaka:



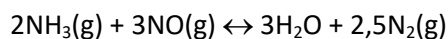
uz pojnu smjesu od 0,5 mol  $\text{N}_2$  i 1,5 mol  $\text{H}_2$  i pretpostavku da se ravnotežna smjesa vlada kao idealni plin, treba pokazati da se ovisnost ravnotežnoga dosegaja reakcije o tlaku može prikazati izrazom:

$$\xi = 1 - (1 + 1,299Kp)^{-0,5}$$

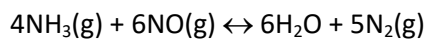
(Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-15

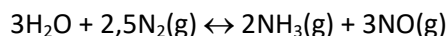
Troje studenata FKIT-a, Štef, Barica i Jagica, bave se problemom određivanja ravnotežnoga sastava o temperaturi i tlaku za zadane početne sastave pojne smjese za reakciju:



Svatko je ispravno riješio problem, ali na drugačiji način. Štef je upotrijebio izvorni zapis reakcije. Barica je reakciju zapisala drugačije, jer ne voli razlomke:



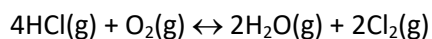
Jagica ima izvrnut pogled na svijet; njen zapis glasi:



Treba napisati izraze za kemijsku ravnotežu za sve tri reakcije, dati relacije koje povezuju tri ravnotežne konstante i pokazati zašto sva tri studenta dobivaju jednake ravnotežne sastave kao rješenje zadatka. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-16

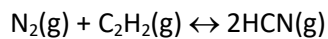
Promatra se ravnoteža reakcije:



pri 500°C i 1 bar. Treba izračunati sastav ravnotežne smjese ako pojna smjesa sadrži 5 mol HCl po molu kisika. Pretpostavlja se idealno vladanje plinske smjese. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-17

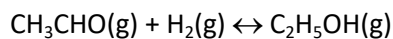
Promatra se ravnoteža reakcije:



pri 650°C i atmosferskome tlaku. Treba izračunati sastav ravnotežne smjese ako se reaktor poji ekvimolarnom smjesom dušika i acetilena. Treba odrediti kako bi na položaj ravnoteže utjecalo udvostručenje tlaka. Pretpostavlja se idealno vladanje plinske smjese. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-18

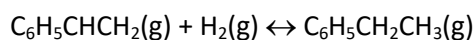
Promatra se ravnoteža reakcije:



pri 350°C i 3 bar. Treba izračunati sastav ravnotežne smjese ako pojna smjesa sadrži 1,5 mol vodika po molu acetaldehida. Treba odrediti kako bi na položaj ravnoteže utjecalo smanjenje tlaka na 1 bar. Pretpostavlja se idealno vladanje plinske smjese. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-19

Promatra se ravnoteža reakcije:



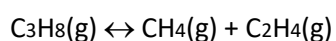
pri 650°C i atmosferskome tlaku. Treba izračunati sastav ravnotežne smjese ako pojna smjesa sadrži 1,5 mol vodika po molu stirena. Pretpostavlja se idealno vladanje plinske smjese. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-20

Izlazna plinska smjesa peći za spaljivanje sumpora sadrži 15 % sumporova dioksida, 20 % kisika i 65 % dušika. Plinska smjesa ulazi pri 1 bar i 480°C u katalitički konverter gdje se sumporov dioksid oksidira u sumporov trioksid. Uz pretpostavku da se uspostavlja termodinamička ravnoteža, koliko topline treba odvesti iz reakcijske smjese da se reakcija odvija izotermno. Kao bazu proračuna uzmite 1 mol ulazne smjese. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-21

Za reakciju cijepanja (krekiranja) propana:



ravnotežna se konverzija može zanemariti pri 300 K, ali postaje znatna pri temperaturama iznad 500 K. Pri tlaku od 1 bar:

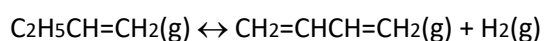
- a) Treba odrediti ravnotežnu konverziju pri 625 K
- b) temperaturu pri kojoj se postiže konverzija od 85 %. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-22

Etilen se proizvodi dehidrogeniranjem etana. Pojna smjesa sadrži i vodenu paru kao inert za bolju toplinsku regulaciju. Omjer H<sub>2</sub>O:etan jest 0,5:1. Treba izračunati ravnotežni sastav produkta (zanemarujući vodu) pri 1100 K i 1 bar. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-23

1,3-butadien može se proizvesti dehidrogeniranjem 1-butena:

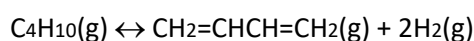


Sporedne se reakcije potiskuju uvođenjem vodene pare u reaktor. Ravnoteža se postiže pri 950 K i 1 bar. Reakcijski produkt sadrži 10 % 1,3-butadiena.

- a) Treba odrediti molarne udjele ostalih komponenti u ravnotežnoj plinskoj smjesi (zanemarujući vodu)
- b) Treba odrediti molarni udio pare u smjesi. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-24

1,3-butadien može se proizvesti dehidrogeniranjem *n*-butana:

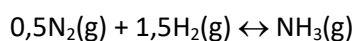


Sporedne se reakcije potiskuju uvođenjem vodene pare u reaktor. Ravnoteža se postiže pri 925 K i 1 bar. Reakcijski produkt sadrži 12 % 1,3-butadiena.

- a) Treba odrediti molarne udjele ostalih komponenti u ravnotežnoj plinskoj smjesi (zanemarujući vodu)
- b) Treba odrediti molarni udio pare u smjesi. (Smith, Van Ness i Abbott)

#### D-25

Pri sintezi amonijaka

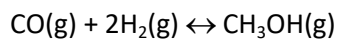


ravnotežna konverzija postiže visoke iznose pri 300 K, koji se brzo smanjuju povišenjem temperature. No, brzina reakcije postaje znatna tek pri povišenim temperaturama. Pojna smjesa sadrži vodik i dušik u stehiometrijskome omjeru.

- a) Treba odrediti molarni udio amonijaka u ravnotežnoj smjesi pri 1 bar i 300 K
- b) Treba odrediti pri kojoj temperaturi ravnotežni molarni udio amonijaka pada na 0,5 pri tlaku od 1 bar
- c) Treba odrediti pri kojoj temperaturi ravnotežni molarni udio amonijaka pada na 0,5 pri tlaku od 100 bar, uz pretpostavku da se plinska smjesa vlada kao idealni plin. (Smith, Van Ness i Abbott)
- d) Treba odrediti pri kojoj temperaturi ravnotežni molarni udio amonijaka pada na 0,5 pri tlaku od 100 bar, uz pretpostavku da se plinska smjesa vlada kao idealna otopina realnih plinova. (Smith, Van Ness i Abbott)

## D-26

Pri sintezi metanola



ravnotežna konverzija postiže visoke iznose pri 300 K, koji se brzo smanjuju povišenjem temperature. No, brzina reakcije postaje znatna tek pri povišenim temperaturama. Pojna smjesa sadrži ugljikov monoksid i vodik u stehiometrijskome omjeru.

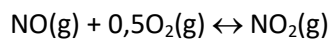
- a) Treba odrediti molarni udio metanola u ravnotežnoj smjesi pri 1 bar i 300 K
- b) Treba odrediti pri kojoj temperaturi ravnotežni molarni udio metanola pada na 0,5 pri tlaku od 1 bar
- c) Treba odrediti pri kojoj temperaturi ravnotežni molarni udio metanola pada na 0,5 pri tlaku od 100 bar, uz pretpostavku da se plinska smjesa vlada kao idealni plin. (Smith, Van Ness i Abbott)
- d) Treba odrediti pri kojoj temperaturi ravnotežni molarni udio metanola pada na 0,5 pri tlaku od 100 bar, uz pretpostavku da se plinska smjesa vlada kao idealna otopina realnih plinova. (Smith, Van Ness i Abbott)

## D-28

Krutina amonijeva klorida raspada se pri zagrijavanju na plinsku smjesu amonijaka i klorovodika. Pri kojoj će temperaturi ravnotežni tlak raspada amonijeva klorida iznositi 1,5 bar. Standardna entalpija i standardna Gibbsova energija nastajanja amonijeva klorida iznose  $-314,43 \text{ kJ/mol}$  i  $-202,87 \text{ kJ/mol}$ . (Smith, Van Ness i Abbott)

**D-30**

Relativni udio NO i NO<sub>2</sub> u zraku određen je reakcijom:



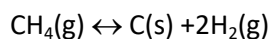
Zrak sadrži 21 % kisika. Temperatura je 25°C a tlak je 1 atm. Treba odrediti koncentraciju NO (u ppm) ako je ukupna koncentracija dvaju dušikovih oksida 5 ppm. (Smith, Van Ness i Abbott)

**D-31**

Razmatra se oksidacija etilena u etilen-oksid pri tlaku od 1 bar uz 25 %-tni suvišak zraka. Reaktanti ulaze u reaktor pri 25°C i reakcija se odvija adijabatski do ravnoteže, a sporedne su reakcije potisnute. Treba odrediti temperaturu i sastav reakcijske smjese na izlazu iz reaktora. (Smith, Van Ness i Abbott)

**D-32**

Čađa se proizvodi razgradnjom metana:

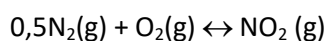
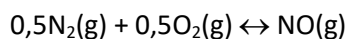


Ravnoteža se uspostavlja pri 650°C i 1 bar.

- a) Treba odrediti sastav plinske faze ako se reaktor poji čistim metanom te ravnotežnu konverziju metana.
- b) Treba odrediti sastav plinske faze ako se reaktor poji smjesom metana i dušika (inert) u omjeru 1:1 te ravnotežnu konverziju metana. (Smith, Van Ness i Abbott)

**D-33**

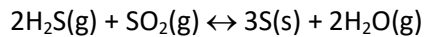
Razmatraju se reakcije:



Ravnoteža se uspostavlja u motoru s unutrašnjim sagorijevanjem pri 2000 K i 200 bar. Treba odrediti molarne udjele NO i NO<sub>2</sub> ako su molarni udjeli dušika i kisika u produktima sagorijevanja 0,70 i 0,05. (Smith, Van Ness i Abbott)

**D-34**

Rafinerije nafte često istodobno proizvode H<sub>2</sub>S i SO<sub>2</sub> kao otpadne procesne struje. Reakcija:



je zgodan način istodobna zbrinjavanja obiju struja.

Reaktanti su u stehiometrijskome omjeru. Treba odrediti konverziju svakoga od reaktanata ako se ravnoteža uspostavlja pri 450°C i 8 bar. (Smith, Van Ness i Abbott)

### D-35

U ravnoteži su dušikov tetroksid i dušikov dioksid:



a) Treba izračunati ravnotežne molarne udjele čestica pri 350 K i 5 bar, uz pretpostavku idealnoga vladanja plinske smjese

b) Ravnotežna smjesa iz prethodne točke prigušuje se na tlak od 1 bar te zatim prolazi kroz izmjenjivač u kojem se vraća na početnu temperaturu. Treba odrediti količinu odvedene topline, pretpostavi li se da se uspostavlja kemijska ravnoteža u konačnome stanju. Kao bazu iskazivanja rezultata treba odabrati 1 mol N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, kao da na početku procesa uopće nije bilo NO<sub>2</sub> u smjesi. (Smith, Van Ness i Abbott)

**D-36** U kapljevitaj se fazi odvija reakcija izomerizacije:



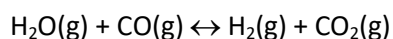
gdje su A i B mješljive kapljevine uz;

$$g^{\text{ex}}/(RT) = 0,1x_Ax_B$$

Standardna Gibbsova reakcijska energija je –1000 J/mol. Treba odrediti ravnotežni sastav smjese pri 25°C. Treba odrediti i grešku koju bi u proračun unijela pretpostavka o idealnoj kapljevitaj otopini. (Smith, Van Ness i Abbott)

### D-38

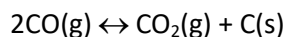
Vodik se proizvodi reakcijom vodene pare i vodenoga plina – ekvimolarne smjese vodika i ugljikova monoksida koja se dobiva reakcijom vodene pare i ugljena. Vodeni se plin miješa s vodenom parom i prevodi preko katalizatora u kojem se ugljikov dioksid konvertira u ugljikov monoksid:



Nereagirana voda kondenzira se, a CO<sub>2</sub> se apsorbira pa u produktu ostaje pretežito vodik. Ravnotežni su uvjeti 1 bar i 800 K.



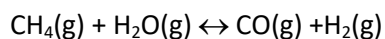
- a) Treba odgovoriti bi li imalo smisla voditi reakciju pri tlakovima višim od 1 bar
- b) Treba odgovoriti što će se dogoditi s ravnotežnom konverzijom CO povisi li se temperatura
- c) Za odabrane ravnotežne uvjete treba odrediti molarni omjer pare i vodenoga plina koji treba odabrati da bi se proizveo plin sa samo 2 % CO nakon hlađenja produkta do 20°C pri čemu se kondenzira praktički sva preostala voda
- d) Treba procijeniti postoji li opasnost od taloženja čvrstoga ugljika pri odabranim ravnotežnim uvjetima. Reakcija je:



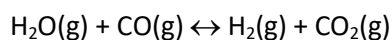
(Smith, Van Ness i Abbott)

### D-39

Jedan od postupaka za proizvodnju sintetskoga plina je katalitička reakciji metana i vodene pare prema:



Uz tu se reakciju paralelno odvija jedino još i pomak vodenoga plina



Pretpostavit će uspostavljanje ravnoteže obiju reakcija pri 1 bar i 1300 K.

- a) Treba odgovoriti bi li imalo smisla provoditi reakcije na tlakovima viših od 1 bar
- b) Treba odgovoriti bi li bilo bolje provesti reakciju na temperaturama ispod 1300 K
- c) Treba odrediti molarni omjer vodika i ugljikova monoksida u produktu ako se pojna smjesa sastoji od ekvimolarne smjese vodene pare i metana.
- d) Treba odrediti molarni omjer vodika i ugljikova monoksida u produktu ako se pojna smjesa sastoji od vodene pare i metana u omjeru 2:1
- e) Treba odrediti u kojem smjeru treba promijeniti sastav plinske smjese da se dobije manji omjer vodika prema ugljikovu monoksidu u odnosu na zadatak c)
- f) Treba procijeniti postoji li opasnost od taloženja čvrstoga ugljika pri odabranim ravnotežnim uvjetima pod c) i d). Reakcija je:



Kako bi trebalo promijeniti sastav reakcijske smjese da se spriječi taloženje koksa. (Smith, Van Ness i Abbott)