

Домашнее задание №4 по курсу Термодинамика

Равновесный состав химически реагирующей газовой смеси

Исходный состав смеси в объемных долях указан в столбцах 1, 2, 3; нумерация столбцов соответствует расположению химических символов в уравнении реакции.

Молярные теплоемкости газов удовлетворяют соотношению

$$C_p = \alpha + \beta T + \gamma T^2 + \sigma T^{-2} \text{ кДж/(кмоль}\cdot\text{К)}.$$

Значения коэффициентов α , β , γ , σ , и необходимые для расчета стандартные величины представлены в таблицах 2 и 3.

Требуется определить:

1. Стандартное изменение энтальпии (тепловой эффект ΔH_{298}^0) и свободной энтальпии (химическое сродство ΔG_{298}^0) для заданной реакции.
2. Изменение тех же величин и значение константы равновесия для указанных температуры и давления.
3. Состав равновесной смеси в массовых и объемных долях; в качестве характеристики степени завершенности реакции использовать величину Z , указанную в последнем столбце таблицы 1.
4. Газовую постоянную и плотность равновесной смеси.
5. Оценить возможность протекания реакции в указанном направлении при стандартных и указанных условиях.
6. Указать направление изменения температуры (T) и давления (P) с целью увеличения завершенности реакции.

Таблица 1

№ варианта	P, МПа	T, К	№ реакции	Состав			Z
				1	2	3	
1	40	3000	2	100	-	-	$\Delta\xi$
2	$9,1 \cdot 10^{-3}$	2000	3	44	56	-	x_2
3	45	665	4	25	75	-	x_2
4	100	800	5	25	75	-	x_2
5	0,01	1023	6	50	50	-	x_2
6	0,1	700	7	50	50	-	x_2
7	0,1	4990	8	79	21	-	x_2
8	10	1270	9	50	50	-	x_2
9	10	625	10	50	50	-	x_2
10	0,2	3500	11	50	50	-	x_2
11	0,1	1100	12	50	50	-	x_2
12	1	800	13	100	-	-	$\Delta\xi$
13	0,14	870	14	100	-	-	$\Delta\xi$
14	0,014	770	15	100	-	-	$\Delta\xi$
15	0,5	5000	1	20	80	-	$\Delta\xi$
16	0,1	1500	2	100	-	-	x_1
17	36	2500	3	35,2	44,8	8	x_1
18	2000	760	4	50	50	-	x_1
19	50	900	5	25	75	-	x_1
20	10	1667	6	67	33	-	x_1
21	0,1	800	7	6	12	82	x_1
22	50	3490	8	50	50	-	$\Delta\xi$
23	0,1	800	9	50	50	-	$\Delta\xi$
24	$3,8 \cdot 10^3$	1500	3	26,7	33,3	16	$\Delta\xi$
25	0,15	4500	16	60	40	-	$\Delta\xi$
26	1	2300	11	75	25	-	$\Delta\xi$
27	0,01	670	13	100	-	-	x_1
28	0,1	670	14	100	-	-	x_1
29	0,1	620	15	100	-	-	x_1
30	0,02	4250	1	50	50	-	x_1

Перечень химических реакции

- $O_2 + mN_2 \rightarrow 2O + mN_2$.
- $2CH_4 \rightarrow C_2H_2 + 3H_2$.
- $4NH_3 + 5O_2 \rightarrow 4NO + 6H_2O$.
- $CO + 2H_2 \rightarrow CH_3OH$.
- $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$.
- $H_2 + 0,5S_2 \rightarrow H_2S$.
- $SO_2 + 0,5O_2 + mN_2 \rightarrow SO_3 + mN_2$.

8. $N_2 + O_2 \rightarrow 2NO$.
9. $C_3H_6 + H_2 \rightarrow C_3H_8$.
10. $C_2H_4 + H_2O \rightarrow C_2H_5OH$.
11. $0,5N_2 + 0,5H_2 + C \rightarrow HCN$.
12. $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$.
13. $2HJ \rightarrow J_2 + H_2$.
14. $COCl_2 \rightarrow CO + Cl_2$.
15. $2NO_2 \rightarrow 2NO + O_2$.
16. $H_2 + mN_2 \rightarrow 2H + mN_2/$

$\Delta\xi$ - мера реакции; x_i - степень превращения i -го (по расположению в уравнении реакции) реагента.

Таблица 2

Формула	Состояние	α	$\beta \cdot 10^3$	$\gamma \cdot 10^6$	$\sigma \cdot 10^{-5}$
CH ₃ OH	г	18,413	101,63	-28,700	0
CH ₅ OH	г	29,265	166,38	-49,931	0
C ₂ H ₄	г	11,848	119,74	-36,634	0
C ₃ H ₆	г	13,619	188,89	-57,526	0
C ₃ H ₈	г	10,090	239,46	-7,3407	0
CO	г	29,879	6,9710	-0,82061	0
Cl ₂	г	31,717	10,150	-4,04020	0
SO ₂	г	29,793	39,824	-14,699	0
SO ₃	г	25,443	98,544	-40,557	0
C	г	16,874	4,7732	0	-8,541
HCN	г	42,414	8,709	0	-10,426
CO ₂	г	44,257	8,7927	0	-8,6252
COCl ₂	г	59,204	32,365	-13,23	-9,923
J ₂	г	37,432	0,58618	0	-0,71179
HJ	г	14,019	29,774	-10,899	7,0970
H ₂ S	г	32,701	12,394	0	-1,9260
H ₂ O	г	30,565	10,300	0	0
NH ₃	г	29,770	25,120	0	-1,549
H ₂	г	27,299	3,2659	0	0,5024
CH ₄	г	23,657	47,899	0	-1,9260
C ₂ H ₂	г	50,788	16,078	0	-10,3000
NO ₂	г	26,508	45,180	-17,996	-1,419
NO	г	33,898	1,7434	-0,1826	-9,1080
N ₂	г	28,597	3,7683	0	-0,50244
O ₂	г	27,979	4,187	0	1,6748
O	г	21,167	-0,3943	0,1059	0,7961
H	г	20,809	0	0	0
S ₂	г	36,5106	0,66992	0	-3,7683

Термодинамические свойства некоторых чистых веществ

Таблица 3

Соединение	Состояние	S_{298}^0 , кДж/(кмоль·К)	$\Delta G_{298}^0 \cdot 10^{-3}$ кДж/кмоль	$\Delta H_{298}^0 \cdot 10^{-3}$ кДж/кмоль
CH ₃ OH	г	237,81	-162,02	-201,63
CH ₅ OH	г	282,19	-168,72	-235,46
C ₂ H ₄	г	219,59	68,169	52,318
C ₃ H ₆	г	267,11	20,427	62,760
C ₃ H ₈	г	270,09	-23,509	-103,91
CO	г	198,03	-137,36	-110,59
Cl ₂	г	223,09	0	0
SO ₂	г	248,69	-300,57	-297,09
SO ₃	г	256,39	-371,61	-395,44
C	г	5,6978	0	0
HCN	г	201,92	120,16	130,62
CO ₂	г	213,78	-394,64	-393,80
COCl ₂	г	289,43	-210,63	-223,15
J ₂	г	260,75	19,384	62,282
HJ	г	206,46	1,2979	25,958
H ₂ S	г	205,78	-32,874	-20,159
H ₂ O	г	188,85	-288,74	-242,02
NH ₃	г	192,63	-16,646	-46,222
H ₂	г	130,67	0	0
CH ₄	г	186,31	-50,827	-74,897
C ₂ H ₂	г	200,95	209,34	226,86
NO ₂	г	240,61	51,874	33,875
NO	г	210,75	86,746	90,434
N ₂	г	191,62	0	0
O ₂	г	205,16	0	0
O	г	160,697	37,704	249,327
H	г	114,693	203,384	218,097
S ₂	г	227,660	0	0