

Chemische Thermodynamica – Opgaven

WC2 – Spontaniteit van Processen

Naam:

TUD-studienummer:

LET OP:

- Vul op dit opgavenformulier, op de daarvoor aangewezen locaties, uw naam en uw Delftse studienummer in.
- Lees eerst alle opgaven door en bepaal uw strategie voor het beantwoorden; in principe worden alle deelvragen even zwaar meegeteld.
- Vul de antwoorden op de vragen in op dit opgavenformulier. Klad- en ander papier wordt niet nagekeken.
- Beantwoord de vragen kort en bondig.
- Denk er om bij “sommen” apart de **methode**, de **numerieke uitwerking** en een **beschouwing** van het resultaat te geven.
- De variabelen dienen van de betreffende BlackBoard-pagina te worden overgenomen. Een ingevuld antwoordvel dient weer te worden ingediend bij BlackBoard.

Opgave 1: Theorie vragen (4 punten)

1. Een proces kan spontaan verlopen van een toestand A naar een toestand B als voor de Gibbs energie geldt
 - $G_A < G_B$
 - $G_A = G_B$
 - $G_A \cong G_B$
 - $G_A > G_B$
2. De Gibbs energie is een toestandsfunctie die niet van waarde verandert bij constante
 - druk, volume en dichtheid.
 - druk, temperatuur en molair volume.
 - druk, temperatuur en samenstelling.
 - druk, entropie en samenstelling.
3. De uitdrukking $dG = Vdp - SdT + \sum_j \mu_j dn_j$ houdt in dat voor het Gibbs energieverval tussen twee toestanden A en B van een vloeistof waarbij alleen de druk verschilt geldt
 - $G_B \approx G_A + (V_B - V_A)p$
 - $G_B \approx G_A + (V_B - V_A)\Delta p$
 - $G_B \approx G_A + V(p_B - p_A)$
 - $G_B \approx G_A + \Delta V(p_B - p_A)$
4. De uitdrukking $dG = Vdp - SdT + \sum_j \mu_j dn_j$ houdt in dat voor het Gibbs energieverval tussen twee toestanden A en B van een vloeistof waarbij alleen de temperatuur verschilt geldt
 - $G_B \approx G_A - (S_B - S_A)T$
 - $G_B \approx G_A - (S_B - S_A)\Delta T$
 - $G_B \approx G_A - \Delta S(T_B - T_A)$
 - $G_B \approx G_A - S(T_B - T_A)$

5. De uitdrukking $dG = Vdp - SdT + \sum_j \mu_j dn_j$ houdt in dat voor het Gibbs energieverval tussen twee toestanden A en B van een vloeistof waarbij alleen de samenstelling verschilt geldt

$G_B \approx G_A + \sum_j (\mu_{j,B} - \mu_{j,A}) n_j$

$G_B \approx G_A + \sum_j \mu_j (n_{j,B} - n_{j,A})$

$G_B \approx G_A + \sum_j (\mu_{j,B} - \mu_{j,A}) \Delta n_j$

$G_B \approx G_A + \sum_j \Delta \mu_j (n_{j,B} - n_{j,A})$

6. Voor een mengsel van twee componenten met molfracties x_A en x_B geldt voor de molaire Gibbs vormingsenergie

$G_m \approx x_A \mu_A^\circ + x_B \mu_B^\circ$

$G_m \approx RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B)$

$G_m \approx x_A \mu_A^\circ + RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B)$

$G_m \approx x_A \mu_A^\circ + x_B \mu_B^\circ + RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B)$

Opgave 2: Kookpunt ethanol (3 punten)

De volgende thermodynamische gegevens zijn bekend voor ethanol (C_2H_6O)

Fase	$\Delta_f G^\circ$ (kJ/mol)	S° (J/mol.K)	M (g/mol)	ρ (kg/dm ³)
vloeistof	-174.8	160.7	46.068	0.7893
gas	-167.9	281.6	46.068	-

a. Bereken aan de hand van bovenstaande gegevens het normale kookpunt uitgedrukt in °C.

- b. Bereken het verschil $\Delta_f G_l - \Delta_f G_v$ in Gibbs energie (in kJ/mol) tussen de damp- en de vloeistoffase bij kamertemperatuur en [p] kPa
 [p] =

- c. Bepaal of ethanol bij de hierboven gegeven toestanden een damp of een vloeistof is.
- Een vloeistof, $\Delta_f G_l < \Delta_f G_v$
 - Een vloeistof, $\Delta_f G_l > \Delta_f G_v$
 - Een damp, $\Delta_f G_v > \Delta_f G_l$
 - Een damp, $\Delta_f G_v < \Delta_f G_l$

Opgave 3 HCl-productie (3 punten)

Een reactorvat is gevuld met chloor en waterstof terwijl de druk 1 Bar bedraagt. Er bevindt zich 0.419 mol chloor gas en 0.0314 mol waterstof gas in de reactor.

De thermodynamische waarden voor de gebruikte gassen zijn

	$\Delta_f G^\circ$ (kJ/mol)	S° (J/(mol K))
H ₂ (g)	0	130.7
Cl ₂ (g)	0	223.1
HCl (g)	-95.3	186.9

- a. Maak een schets van het reactieverloop.

- b. Bereken de Gibbs energie (J) van menging. $\Delta_{\text{mix}}G$, bij een temperatuur van $[t]$ °C voor de situatie voordat de reactie heeft plaatsgevonden.
[t] =
- c. Bereken de Gibbs vormingsenergie (in kJ/mol) $\Delta_f G_j$ voor de drie componenten in de reactor bij 0°C en 1.0 Bar.
- d. Bereken het verschil in Gibbs energie, $\Delta G(1) - \Delta G(0)$, (in kJ) tussen het begin ($\xi = 0$) van de reactie en bij volledige conversie ($\xi = 1$) bij $[t]$ °C en 1 Bar. Verwaarloos daarbij de variatie in de mengbijdrage.
[t] =
- e. Bereken de Gibbs energie als functie van de reactievoortgang bij en bekijk of deze reactie tot het einde ($\xi = 1$) spontaan plaatsvinden.
- $\Delta G < 0$: de reactie verloopt spontaan.
 - $\Delta G < 0$: de reactie verloopt niet spontaan.
 - $\Delta G > 0$: de reactie verloopt spontaan.
 - $\Delta G > 0$: de reactie verloopt niet spontaan.