

Chemische Thermodynamica – Opgaven

WC3 – Beschikbare arbeid

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. Kladd- 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, OV - Processen - Gibbs energie)

- a. Een proces kan spontaan verlopen van een toestand A naar een toestand B als voor de Gibbs energie geldt
- $G_A < G_B$
 - $G_A = G_B$
 - $G_A \cong G_B$
 - $G_A > G_B$
- b. De arbeid W die een proces, dat verloopt van toestand A naar toestand B, kan leveren is gegeven door het verschil $\Delta G = G_B - G_A$ als
- $|W| \leq |\Delta G|$
 - $|W| = |\Delta G|$
 - $|W| \triangleq |\Delta G|$
 - $|W| \geq |\Delta G|$
- c. 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.
- d. 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
- $G_B \approx G_A + (V_B - V_A)p$
 - $G_B \approx G_A + (V_B - V_A)\Delta p$
 - $G_B \approx G_A + V(p_B - p_A)$
 - $G_B \approx G_A + \Delta V(p_B - p_A)$
- e. 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
- $G_B \approx G_A - (S_B - S_A)T$
 - $G_B \approx G_A - (S_B - S_A)\Delta T$
 - $G_B \approx G_A - \Delta S(T_B - T_A)$
 - $G_B \approx G_A - S(T_B - T_A)$

f. 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

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

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

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

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

g. 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: Methanol brandstofcel (3 punten, WC 3: Beschikbare Arbeid I)

Een alternatief voor de waterstof-brandstofcel is de methanol brandstofcel. Het grote voordeel is dat de methanol als vloeistof aangevoerd kan worden bij standaard omstandigheden. Het nadeel is de productie van koolzuurgas.

Verbinding	$\Delta_f G^\circ$ (kJ/mol)	S° (J/(Kmol))
Methanol (l)	-162.3	126.8
Zuurstof	0.0	205.2
Koolzuur	-394.4	213.8
Water (v)	-228.1	188.8
Water (l)	-237.1	70.0

a. Schrijf de totaalreactie op. Wat is de stoichiometrische coëfficiënt van zuurstof?

-1/2

-1

-3/2

-2

b. Schrijf de deelreacties uit. Wat is de stoichiometrische coëfficiënt van de elektronen?

6

3

3/2

2

c. De brandstofcel wordt bedreven bij $[t]^\circ\text{C}$ waarbij puur zuurstof en methanol separaat worden toegevoerd. We berekenen nu de "Lower Heating Value" (LHV) van de open spanning; let op dat koolzuurgas en water niet mengen, het zijn verschillende fasen. (Geef de absolute waarde in Volt).

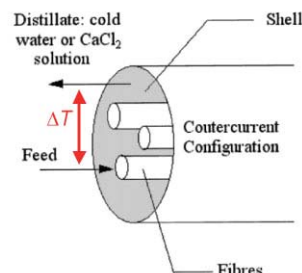
- d. De brandstofcel wordt bedreven bij $[t]^{\circ}\text{C}$ waarbij puur zuurstof en methanol separaat worden toegevoerd. We bereken nu de "Higher Heating Value" (HHV) van de open spanning; hierbij wordt aangenomen dat koolzuurgas en waterdamp mengen. (Geef de absolute waarde in Volt).
- e. De brandstofcel wordt bedreven bij $[t]^{\circ}\text{C}$ waarbij lucht (21% zuurstof) en methanol separaat worden toegevoerd. We berekenen nu de "Lower Heating Value" (LHV) van de open spanning, waarbij wordt aangenomen dat koolzuurgas en water als vloeistof met zuurstofarme lucht separaat uittreden. (Geef de absolute waarde in Volt).

Opgave 3 Appelsapfabriek (3 punten, WC 3: Beschikbare Arbeid II)

Gebaseerd op: *Direct contact membrane distillation: modelling and concentration experiments* by F Laganà, G. Barbieri, and E. Drioli; J Membrane Sci 166 (2000) 1-11. De volgende gegevens zijn bekend

Verbinding	$\Delta_f G^{\circ}$ (kJ/mol)	S° (J/mol.K)	M (g/mol)	ρ (kg/dm ³)
Sucrose in water	-	-	342.296	1.587
Water	-237.1	70.0	18.015	0.997

In een appelsapfabriek gebruikt men het temperatuurverschil tussen net klaargemaakte warme appelsap in poreuze buis en koelwater er om heen om de sap te concentreren, zie onderstaande figuur. Laten we voor de eenvoud veronderstellen dat appelsap een waterige suikeroplossing (sucrose) is waarvoor de gegevens hierboven beschikbaar zijn. De appelsap dient met een factor 100 geconcentreerder te worden gemaakt.



- a. Bereken de molfractie (in mmol/mol) sucrose in een $[m]$ g/kg appelsap.

- b. Bereken het molaire Gibbs mengenergieverschil (in J/mol) tussen de appelsap (5 g/kg) en het concentraat (500 g/kg) bij $[t]^{\circ}\text{C}$ (Let op het teken).
- c. Stel dat er een temperatuurverschil van $[t]$ K tussen appelsap en koelwater (op kamertemperatuur) nodig is om de appelsap (5 g/kg) te concentreren tot 500 g/kg. Wat is het Gibbs energieverval (in J/mol) tussen het appelsap en het koelwater. Verwaarloos de invloed van de sucrose op dit energieverval.
- d. Bereken het temperatuurverschil (in K) tussen het appelsap (5 g/kg) en het concentraat (500 g/kg, op $[t]^{\circ}\text{C}$) dat nodig is om dat concentraat op de juiste concentratie te krijgen. Vul het getal in zonder teken.