

Ημερομηνία Παράδοσης: 11/1/2021

Άσκηση 1

Δίνονται οι εξής αντιδράσεις, οι οποίες λαμβάνουν χώρα ταυτόχρονα στην αέρια φάση σε πίεση 1 atm:

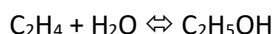


(α) Ξεκινώντας με ένα mole A και ένα mole B, πόσα moles C, D και E υπάρχουν στην ισορροπία;

(β) Να γίνει το διάγραμμα $e_2 - e_1$ και για τις δύο αντιδράσεις στο ίδιο σύστημα αξόνων και να σχολιαστεί.

Άσκηση 2

Η αιθανόλη παράγεται από την αντίδραση του αιθυλενίου με νερό στην αέρια φάση:



(α) Δίνονται οι πρότυπες ιδιότητες σχηματισμού στους 298 K (Πίνακας 1) και οι ειδικές θερμότητες (Πίνακας 2) των συστατικών που συμμετέχουν στην αντίδραση. Η αντίδραση είναι ενδόθερμη ή εξώθερμη στους 35X K;

(β) Να βρεθεί η σύσταση του μείγματος στην ισορροπία, σε συνθήκες: (i) 35X K, 1.Y bar και (ii) 35X K, 15.Y bar. Η αέρια φάση να θεωρηθεί ιδανική. Για τον υπολογισμό της σταθεράς ισορροπίας να θεωρηθεί ότι η ενθαλπία της αντίδρασης είναι ανεξάρτητη της θερμοκρασίας.

Να σχολιαστούν τα αποτελέσματα.

(γ) Να επαναληφθεί το ερώτημα (β) θεωρώντας αυτή τη φορά μη ιδανική αέρια φάση. Η περιγραφή της αέριας φάσης να γίνει με την καταστατική εξίσωση Virial εκφρασμένη ως προς την πίεση και αποκομμένη μετά τον δεύτερο δραστικό συντελεστή. **Να σχολιαστούν τα αποτελέσματα και γίνει σύγκριση ανάμεσα στα αποτελέσματα των ερωτημάτων (β) και (γ).**

Δίνονται οι κρίσιμες ιδιότητες και ο ακεντρικός παράγοντας των συστατικών (Πίνακας 3) καθώς και οι ακόλουθες τιμές για την έκφραση του B της Virial (Tsonopoulos, 1974):

- Αιθανόλη: $a = 0.0878$, $b = 0.0572$
- Νερό: $a = 0.0279$, $b = 0.0229$

Για τους συνδυαστικούς κανόνες να θεωρηθεί ότι για τα αιθυλένιο/αιθανόλη και αιθυλένιο/νερό ισχύει $a_{ij} = b_{ij} = 0$, ενώ για το νερό/αιθανόλη ισχύει $a_{ij} = (a_i + a_j)/2$ και $b_{ij} = (b_i + b_j)/2$.

Πίνακας 1

Συστατικό	ΔG_f° (kJ/mol)	ΔH_f° (kJ/mol)
Αιθυλένιο	68.46	52.51
Νερό	-228.6	-241.8
Αιθανόλη	-168.5	-235.1

Πίνακας 2

$$C_p [J/(mol \cdot K)] = a + bT + cT^2 + dT^3, T \text{ σε } [K]$$

Συστατικό	a	b ($\times 10^2$)	c ($\times 10^5$)	d ($\times 10^9$)
Αιθυλένιο	3.950	15.628	-8.339	17.657
Νερό	32.218	0.192	1.055	-3.593
Αιθανόλη	19.875	20.946	-10.372	20.042

Πίνακας 3

Συστατικό	Tc (K)	Pc (bar)	Vc (cm ³ /mol)	ω
Αιθυλένιο	282.34	50.41	131.1	0.087
Νερό	647.14	220.64	55.95	0.344
Αιθανόλη	513.92	61.37	167.0	0.635

Όπου X, Y τα δύο τελευταία ψηφία του αριθμού μητρώου σας.

Παράδειγμα: Έστω AM που λήγει σε 48, X=4 και Y=8.

Στην Άσκηση 1 $K_1 = 5 \cdot X = 5.4$, $K_2 = 0.68Y = 0.688$

Στην Άσκηση 2 (β) (i) $T = 35X = 354 \text{ K}$ και $P = 1 \cdot Y = 1.8 \text{ bar}$

(ii) $T = 35X = 354 \text{ K}$ και $P = 15 \cdot Y = 15.8 \text{ bar}$

Στην έκθεση σας να αναφέρετε τυχόν παραδοχές και να σχολιάσετε τα αποτελέσματα. Τα διαγράμματα και οι πίνακες που ζητούνται ΠΡΕΠΕΙ να περιέχονται στην έκθεσή σας. Μαζί με την έκθεση παραδίδετε και τα αρχεία που χρησιμοποιήσατε για τους υπολογισμούς.