

Alkalmazott kémia
2019-2020 2. félév

Számítási gyakorlat
2020. 03. 03.

Domán Andrea
doman.andrea@mail.bme.hu

1. Példa

Mekkora a benzol normál forráspontja, ha gőznyomása 58,8 °C-on 50,0 kPa és párolgási entalpiája 30,75 kJ/mol?

1. Példa - megoldás

$$P_1 = 50 \text{ kPa} = 50\,000 \text{ Pa}$$

$$P_2 = 10^5 \text{ Pa}$$

$$\Delta_{\text{pár}}H_m = 30,78 \text{ kJ/mol} = 30780 \text{ J/mol}$$

$$T_1 = 58,8 \text{ °C} = 273,15 + 58,8 \text{ K} = 331,95 \text{ K}$$

$$T_2 = ?$$

Clausius-Clapeyron egyenlet alkalmazása

$$\ln \frac{p_1}{p_2} = \frac{\Delta_{\text{pár}}H_m}{R} * \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$\ln \frac{50000 \text{ Pa}}{100000 \text{ Pa}} = \frac{30780 \text{ J/mol}}{8,314 \text{ J/(molK)}} * \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{331,95 \text{ K}} \right)$$

$$\frac{1}{T_2} = \frac{\ln \frac{50000 \text{ Pa}}{100000 \text{ Pa}}}{\frac{30780 \text{ J/mol}}{8,314 \text{ J/(mol*K)}}} + \frac{1}{331,95 \text{ K}} = 0,00282 \text{ 1/K}$$

$$T_2 = \frac{1}{0,00282} = 353,95 \text{ K} = \mathbf{80,8 \text{ °C}}$$

P_i : gőznyomás adott hőmérsékleten [Pa]

T_i : gőznyomáshoz tartozó hőmérséklet [K]

$\Delta_{\text{pár}}H_m$: moláris párolgáshő [J/mol]

R: egyetemes gázállandó [J/(mol*K)]

$R = 8,314 \text{ J/(mol*K)}$

A benzol forráspontja normal körülmények között 80,8 °C.

2. Példa

Mekkora térfogatú etilén-glikolt ($C_2H_6O_2$) kell 15 liter vízhez adni, hogy a fagyálló fagyáspontja $-30\text{ }^\circ\text{C}$ legyen? (glikol sűrűsége: $1,11\text{ g/ml}$). Mekkora tömegű Na_2SO_4 -al lehetne ugyan ilyen fagyáspontcsökkenést elérni?

2. Példa - megoldás

a) Etilén-glikol

$$V_{\text{H}_2\text{O}} = 15 \text{ l (oldószer)} = 15 \text{ kg } (\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 1 \text{ g/cm}^3 = 1 \text{ kg/dm}^3)$$

$$\rho_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2} = 1,11 \text{ g/ml}$$

$$T_{\text{fp, fagyálló}} = -30 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$V_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2} = ? \text{ (oldott anyag)}$$

Krioszkópos állandó

Fagyáspont csökkenés

$$\Delta_m T = \frac{R * T_{\text{fp, osz}} * M_{\text{osz}}}{\Delta H_{\text{olv}}} * m_{\text{oa}}$$

$$m_{\text{oa}} \rightarrow V_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2}$$

$$T_{\text{fp}} (\text{H}_2\text{O}) = 0 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$\Delta_m T = T_{\text{fp}} (\text{H}_2\text{O}) - T_{\text{fp, fagyálló}} = 0 \text{ }^\circ\text{C} - (-30 \text{ }^\circ\text{C}) = 30 \text{ }^\circ\text{C} = 30 \text{ K}$$

$$m_{\text{oa}} = \Delta_m T * \frac{\Delta H_{\text{olv}}}{R * T_{\text{fp, osz}} * M_{\text{osz}}} = 30 \text{ K} * \frac{6010 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{8,314 \frac{\text{J}}{(\text{mol} * \text{K})} * 273,15 \text{ K} * 0,018 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}} = 16,2 \text{ mol/kg}$$

1 kg vízhez kell 16,2 mol etilén-glikol \rightarrow 15 kg vízhez kell $16,2 \text{ mol/kg} * 15 \text{ kg} = 243 \text{ mol}$

$$V_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2} = \frac{m_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2}}{\rho_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2}} = \frac{n_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2} * M_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2}}{\rho_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2}} = \frac{243 \text{ mol} * 62 \text{ g/mol}}{1,11 \text{ g/ml}} = 13572 \text{ ml} = \mathbf{13,6 \text{ l}}$$

$\Delta_m T$: moláris fagyáspont csökkenés [K]

T_{fp} : fagyáspont [K]

ΔH_{olv} : oldószer moláris olvadáshő [J/mol]

$T_{\text{fp, osz}}$: oldószer fagyáspontja [K]

M_{osz} : oldószer moláris tömege [kg/mol]

m_{oa} : oldott anyag molaritása [mol részecske/kg osz.]

2. Példa - megoldás

b) Na_2SO_4

$m_{\text{Na}_2\text{SO}_4} = ?$

$m_{\text{oa}} \rightarrow m_{\text{Na}_2\text{SO}_4}$

$m_{\text{oa}} = 243$ mol oldott részecske kell 15 kg vízhez

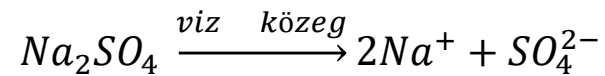
Fagyáspont csökkenés, Forráspont emelkedés, ozmózisnyomás

=

kolligatív sajátosságok



Oldott részecskék mennyisége számít!!!



1 mol Na_2SO_4 vízben való oldásakor 3 mol részecske kerül a vizes rendszerbe!



$$n_{\text{Na}_2\text{SO}_4} = 243/3 = 81 \text{ mol}$$

$$m_{\text{Na}_2\text{SO}_4} = n_{\text{Na}_2\text{SO}_4} * M_{\text{Na}_2\text{SO}_4} = 81 \text{ mol} * 142 \text{ g/mol} = 11502 \text{ g} = \mathbf{11,5 \text{ kg}}$$

13,6 liter etilén-glikol szükséges ahhoz, hogy a 15 kg víz fagyáspontját – 30 °C-ra csökkentsük, ugyan ezt a fagyáspont csökkenést 11,5 kg Na_2SO_4 -al lehet elérni.

3. Példa

A kaliforniában élő mammutfenyőt tartják a világ legmagasabbra növvő fájának. Magasságuk elérheti a 105 métert. Mekkora ozmózisnyomás szükséges a víz feljuttatásához a gyökerektől a fa tetejéig, ha a víz sűrűsége 1 g/ml. Milyen koncentrációjú cukoroldattal lehetne ezt az ozmózisnyomást elérni?

3. Példa - megoldás

$$\Pi = \rho \cdot g \cdot h = 1 \text{ g/ml} \cdot 105 \text{ m} \cdot 9,82 \text{ m/s}^2$$

$$\Pi = 1000 \text{ kg/m}^3 \cdot 105 \text{ m} \cdot 9,82 \text{ m/s}^2$$

$$\underline{\underline{\Pi}} = 1031100 \text{ kg/(m}\cdot\text{s}^2) = 1031100 \text{ Pa} = \underline{\underline{1031,1 \text{ kPa}}}$$

1031,1 kPa szükséges a víz feljuttatásához.

$$\Pi = R \cdot T \cdot C_B$$

$$1031100 \text{ Pa} = 8,314 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)} \cdot 298,15 \text{ K} \cdot C_B$$

$$C_B = 1031100 \text{ N/m}^2 / (8,314 \text{ N}\cdot\text{m/(mol}\cdot\text{K)} \cdot 298,15 \text{ K}) = 416 \text{ mol/m}^3$$

$$\underline{\underline{C_B}} = \underline{\underline{0,416 \text{ mol/dm}^3}}$$

0,416 mol/dm³ koncentrációjú cukoroldattal lehetne ezt elérni.

$$1 \text{ g/ml} = 1 \text{ g/cm}^3 = 10^6 \text{ g/m}^3 = 1000 \text{ kg/m}^3 \quad (1 \text{ m}^3 = 1\,000\,000 \text{ cm}^3)$$

$$\text{Pa} = \text{N/m}^2 = (\text{kg} \cdot \text{m/s}^2) / \text{m}^2 = \text{kg/(m}\cdot\text{s}^2)$$

$$\text{J} = \text{N} \cdot \text{m}$$

Π : ozmózis nyomás	[Pa]
ρ : sűrűség	[kg/m ³]
h : folyadékoszlop magassága	[m]
g : nehézségi gyorsulás	[m/s ²]
$g = 9,82 \text{ m/s}^2$	
$C_B = \text{molaritás}$	[mol/dm ³]

4. Példa

Mekkora annak a folyamatnak a felezési ideje, amelynek reakciósebességi állandóját $0,75 \text{ mmol/l}$ kiindulási koncentráció esetén $1,78 \cdot 10^{-4} \text{ liter}/(\text{mol} \cdot \text{s})$ -nak találtuk. Hányad rendű a folyamat?

4. Példa - megoldás

$$k = 1,78 \cdot 10^{-4} \text{ l}/(\text{mol} \cdot \text{s})$$

$$c_0 = 0,75 \text{ mmol/l} = 0,75 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$$

$$T_{1/2} = ?$$

Elsőrendű folyamat

$$T_{1/2} = \ln 2 / k$$

$$c = c_0 \cdot e^{-k \cdot t}$$

$$c/c_0 = e^{-k \cdot t}$$

$$\ln(c_t) - \ln(c_0) = \ln(c_t/c_0) = -k \cdot t$$

Másodrendű folyamat

$$T_{1/2} = 1 / k \cdot c_0$$

$$1/c = 1/c_0 + k \cdot t$$

$T_{1/2}$: felezési idő

[s]

c_0 : kiindulási koncentráció a t_0 időpillanatban

[mol/dm³]

c : koncentráció tetszőleges t időpillanatban

[mol/dm³]

k : reakciósebességi állandó

[függ a reakció rendűségétől!]

$k_{\text{elsőrendű}}$ [1/s]

$k_{\text{másodrendű}}$ [dm³/(mol*s)]

$$T_{1/2} = 1 / (1,78 \cdot 10^{-4} \text{ l}/(\text{mol} \cdot \text{s}) \cdot 0,75 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}) = 7490636 \text{ s}$$

A folyamat másodrendű, felezési ideje 7490636 s.

5. Példa

Egy anyag bomlásának sebességi állandója 30 °C-on $2,8 \cdot 10^{-3} \text{ 1/(M*s)}$, 50 °C-on $1,38 \cdot 10^{-2} \text{ 1/(M*s)}$. Számítsuk ki az aktiválási energiáját.

5. Példa - megoldás

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

M = mol/l

$$T_1 = 30 \text{ }^\circ\text{C} = 303 \text{ K}$$

$$k_1 = 2,8 \cdot 10^{-3} \text{ 1/(M*s)}$$

$$T_2 = 50 \text{ }^\circ\text{C} = 323 \text{ K}$$

$$k_2 = 1,38 \cdot 10^{-2} \text{ 1/(M*s)}$$

k és E_a kapcsolata:

$$k = A * e^{-\frac{E_a}{R*T}}$$

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{R*T}$$

$$\ln k_1 = \ln A - \frac{E_a}{RT_1} \rightarrow \ln A = \ln k_1 + \frac{E_a}{RT_1}$$

$$\ln k_2 = \ln A - \frac{E_a}{RT_2} \rightarrow \ln A = \ln k_2 + \frac{E_a}{RT_2}$$

módszer 2: egyenletek átrendezése

$$\ln k_1 + \frac{E_a}{RT_1} = \ln k_2 + \frac{E_a}{RT_2}$$

$$\ln k_1 - \ln k_2 = \frac{E_a}{RT_2} - \frac{E_a}{RT_1}$$

- módszer 1: két egyenlet kivonása egymásból

$$\ln k_1 - \ln k_2 = \ln A - \frac{E_a}{RT_1} - \left(\ln A - \frac{E_a}{RT_2} \right)$$

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{RT_2} - \frac{E_a}{RT_1} = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

Logaritmus azonosságok

$$\ln(x) - \ln(y) = \ln\left(\frac{x}{y}\right)$$

$$\ln(x) + \ln(y) = \ln(x \cdot y)$$

$$\ln(e^x) = x$$

$$E_a = \frac{R \cdot \ln \frac{k_1}{k_2}}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}} = \frac{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} \cdot \ln \frac{2,8 \cdot 10^{-3} \frac{1}{\text{Ms}}}{1,38 \cdot 10^{-2} \frac{1}{\text{Ms}}}}{\frac{1}{323 \text{ K}} - \frac{1}{303 \text{ K}}} = 64893 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Az aktiválási energia 64,9 kJ/mol.

k: reakciósebességi állandó [1/(M*s)]

A: preexponenciális tényező (empirikus adat)

E_a : aktiválási energia [J/mol]

T: hőmérséklet [K]

R: egyetemes gázállandó

6. Példa

Írja fel az ecetsav (CH_3COOH) és víz reakciójának az egyenletét! Mekkora a pH-ja, pOH-ja, pKb és pKa értéke, disszociáció foka a 0,1 mol/l-es ecetsav oldatnak 25 °C-on? $K_a=1,78 \cdot 10^{-5}$.

6. Példa - megoldás

1. Reakcióegyenlet:



$$c_0 = 0,1 \text{ mol/l}$$

$$K_a = 1,78 \cdot 10^{-5}$$

2. pK_b, pK_a számítás

$$\text{pK}_a = -\log(K_a) = -\log(1,78 \cdot 10^{-5}) = 4,74$$

$$\text{pK}_b = -\log(K_b) = 14 - \text{pK}_a = 9,26$$

3. Gyenge vagy erős sav?

$K_a \ll \ll \rightarrow$ tehát gyenge sav \rightarrow nem disszociál teljes mértékben, $\alpha < 1$

4. Disszociáció fok számítás

$$K_a = \frac{\alpha^2 \cdot c_0}{(1-\alpha)} \quad K_a \ll \ll \rightarrow \alpha \ll \ll \ll \rightarrow (1-\alpha) \sim 1$$

$$K_a = \alpha^2 \cdot c_0$$

$$\alpha = \sqrt{K_a / c_0} = \sqrt{(1,78 \cdot 10^{-5} / 0,1)} = 1,33 \cdot 10^{-4}$$

5. pH, pOH számítás

$$\text{pH} = -\log[\text{H}_3\text{O}^+] = -\log(c_0 \cdot \alpha) = -\log(0,1 \cdot 1,33 \cdot 10^{-4}) = 4,9$$

$$\text{pOH} = 14 - \text{pH} = 5,1$$

K_a : savi disszociációs állandó

K_b : bázikus disszociációs állandó

c_0 : koncentráció [mol/dm³]

$[\text{H}_3\text{O}^+]$: oxóniumion koncentráció [mol/dm³]

α : disszociáció fok ($0 < \alpha < 1$)

Az ecetsav pK_a értéke 4,74, pK_b értéke 9,26, a 0,1 M-os oldatban az ecetsav disszociációfoka $1,33 \cdot 10^{-4}$, az oldat pH-ja 3,87, pOH-ja 10,13.

7. Példa

A $\text{Zn(s)} + \text{H}_2\text{O(g)} \leftrightarrow \text{ZnO(s)} + \text{H}_2\text{(g)}$ egyensúlyi folyamat standard reakcióhője $+224 \text{ kJ/mol}$. 1600 K -en ugyanennek a reakciónak a standard szabadentalpiája $+33 \text{ kJ/mol}$. Feltételezve, hogy mindkét mennyiség állandó, határozza meg azt a hőmérsékletet, ahol az egyensúlyi állandó 1-nél nagyobbá válik.

7. Példa - megoldás

$$K_1 = ? \quad T_1 = 1600 \text{ K}$$

$$K_2 > 1 \quad T_2 = ?$$

$$\Delta G^0 = 33 \text{ kJ/mol} = 33000 \text{ J/mol}$$

$$\Delta H^0 = 244 \text{ kJ/mol} = 244000 \text{ J/mol}$$

1. K_1 számítása

$$\ln K_1 = -\frac{\Delta G^0}{R * T} = -\frac{33000 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} * \text{K}} * 1600 \text{ K}} = -2,481$$

2. T_2 számítása ha $K_2 = 1$

$$\ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{-\Delta H^0}{R} * \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$\ln K_2 - \ln K_1 = \frac{-\Delta H^0}{R} * \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$0 - (-2,481) = \frac{-22400 \text{ J/mol}}{8,314 \text{ J}/(\text{mol} * \text{K})} * \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{1600 \text{ K}} \right)$$

$$2,481 = \frac{-22400 \text{ J/mol}}{8,314 \text{ J}/(\text{mol} * \text{K})} * \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{1600 \text{ K}} \right)$$

$$T_2 = 1876,47 \text{ K}$$

1. K és ΔG_0 kapcsolata: 2. K -nak a T -függése:

$$\ln K = -\frac{\Delta G^0}{R * T}$$

$$\ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{-\Delta H^0}{R} * \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

ΔG_0 : standard szabadentalpia [J/mol]

ΔH_0 : standard reakcióhő/reakcióentalpia [J/mol]

K : egyensúlyi állandó [-]

Amit ki tudunk számolni a két egyenlet alapján:

1. K_1

2. Azt a T_2 hőmérsékletet amely esetén K_2 éppen 1

ha $K_2 = 1$ teljesül, akkor $\ln K_2 = 0$

$$\ln(K_2/K_1) = \ln K_2 - \ln K_1 = 0 - (-2,481)$$

A reakció endoterm mivel $\Delta H^0 > 0$, tehát a hőmérséklet növelése a termékképződés irányába tolja el a reakciót, így K értéke egynél nagyobb ha $T > 1876,5 \text{ K}$ ekkor nő.

Tehát az egyensúlyi állandó 1876,5 K felett nagyobb, mint 1.

magyarázat