

Termopving 10

Oppgave 1

Vet at $a_{cd} = 0,617$ når $x_{cd} = 0,7$

Ved Gibbs-Duhem: $\sum_{i=1}^N x_i dG_i = 0$, la $G_d = 1$, $M_g = 2$

$$\Rightarrow x_1 dG_1 + x_2 dG_2 = 0, \quad G_i = G_i^0 + \Delta G_i^M$$

$$\Rightarrow x_1 d\Delta G_1^M + x_2 d\Delta G_2^M = 0$$

reference state = konstant
 $\Rightarrow dG_i^0 = 0$

$$\Delta G_i^M = RT \ln a_i$$

$$x_1 d(RT \ln a_1) + x_2 d(RT \ln a_2) = 0, \quad R, T = \text{const}$$

$$x_1 d(\ln a_1) + x_2 d(\ln a_2) = 0$$

$$d(\ln a_1) = -\frac{x_2}{x_1} d(\ln a_2), \text{ integrer:}$$

$$\int_{0,617}^{a_{cd}} d(\ln a_{cd}) = - \int_{x_{cd}=0,7}^{x_{cd}=0,4} \frac{x_{Mg}}{x_{cd}} d \ln(a_{Mg})$$

$$\ln a_{cd} = \ln 0,617 - \int_{x_{cd}=0,7}^{x_{cd}=0,4} \frac{x_{Mg}}{x_{cd}} d \ln(a_{Mg})$$

Vet også at $a_{Mg} = x_{Mg} \cdot \gamma_{Mg}$, må numerisk beregne integralet

x_{cd}	x_{Mg}	γ_{Mg}	a_{Mg}	$-\ln a_{Mg}$	$\frac{x_{Mg}}{x_{cd}}$	$\Delta(-\ln a_{Mg})$	$\Delta(\frac{x_{Mg}}{x_{cd}})$
0,7	0,3	0,339	0,1017	2,29	0,43		
0,6	0,4	0,439	0,1756	1,74	0,67	0,55	0,24
0,5	0,5	0,566	0,2830	1,26	1	0,48	0,33
0,4	0,6	0,668	0,4008	0,91	1,50	0,35	0,5

$$\Rightarrow A_{real} = 1,132$$

$$\Rightarrow a_{cd} = \exp(\ln 0,617 - 1,132) = 0,199$$

Oppgave 2

$$\ln \gamma_{Sn} = 0,73 - 1,5 \cdot X_{Sn}$$

Ønsker å erstatte γ_{Sn} med γ_{Fe} og X_{Sn} med X_{Fe}

γ -metoden:

$$\ln \gamma_A = - \int_{X_A=1}^{X_A} \frac{X_B}{X_A} d \ln \gamma_B$$

$$\Rightarrow \ln \gamma_{Fe} = - \int_{X_{Fe}=1}^{X_{Fe}} \frac{X_{Sn}}{X_{Fe}} d(0,73 - 1,5 X_{Sn}) \quad / \cdot X_{Sn} = 1 - X_{Fe}$$

$$\Rightarrow \ln \gamma_{Fe} = - \int_{X_{Fe}=1}^{X_{Fe}} \frac{1 - X_{Fe}}{X_{Fe}} d(1,5 X_{Fe} - 0,77)$$

$$\left[\begin{aligned} & d(1,5 X_{Fe} - 0,77) \cdot \frac{dX_{Fe}}{dX_{Fe}} = \frac{d}{dX_{Fe}} (1,5 X_{Fe} - 0,77) dX_{Fe} \\ & \Rightarrow d(1,5 X_{Fe} - 0,77) = 1,5 dX_{Fe} \end{aligned} \right]$$

$$\ln \gamma_{Fe} = - \int_{X_{Fe}=1}^{X_{Fe}} \left(\frac{1}{X_{Fe}} - 1 \right) \cdot 1,5 dX_{Fe}$$

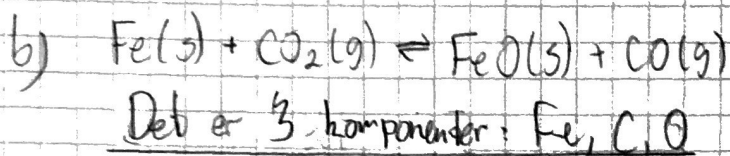
$$= -1,5 \left[\ln X_{Fe} - X_{Fe} \right]_1^{X_{Fe}}$$

$$= -1,5 (\ln X_{Fe} - X_{Fe} - (0 - 1))$$

$$\underline{\underline{\ln \gamma_{Fe} = -1,5 + 1,5 X_{Fe} - 1,5 \ln X_{Fe}}}$$

Oppgave 3

- a) $f = C - p + n$ hvor f er frihetsgrad,
 C er antall komponenter
 p er antall faser i likevekt
 $n = 1$ (trykk eller temperatur)
 $n = 2$ (trykk og temperatur)

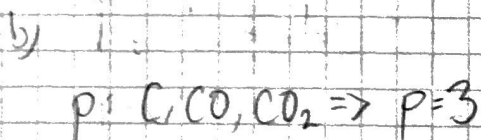
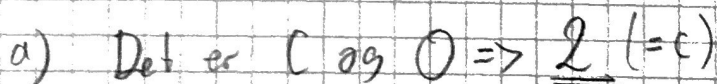


c) $p = 4$

$$f = 3 - 4 + 2 = 1$$

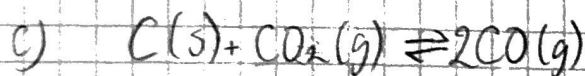
$$\underline{\underline{f = 1}}$$

Oppgave 4



$$f = 2 - 3 + 2 = 1$$

$$\underline{\underline{f = 1}}$$



$$\Delta G = 0 \text{ ved likevekt} \Rightarrow \Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln K = 0$$

$$\Rightarrow RT \ln K = -\Delta G^\circ$$

$$K = e^{-\frac{\Delta G^\circ}{RT}}$$

$$K = \frac{a_{\text{CO}}^2}{a_{\text{C}} \cdot a_{\text{CO}_2}} = \frac{a_{\text{CO}}^2}{a_{\text{CO}_2}} = \frac{(P_{\text{CO}}/p^\circ)^2}{(P_{\text{CO}_2}/p^\circ)} = \frac{1}{p^\circ} \cdot \frac{(1 - P_{\text{CO}_2})^2}{P_{\text{CO}_2}}$$

$\begin{array}{ccc} \parallel & & \parallel \\ 1 & & 1 \text{ atm} \end{array}$

$$K = \frac{(1 - 2P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}_2}^2)}{P_{\text{CO}_2}}$$

$$P_{\text{CO}_2}^2 - (2 + K)P_{\text{CO}_2} + 1 = 0$$

- Basert på diskusjonsforumet skal $K=1$

↳ Jeg får at $\Delta G^\circ = -7748 \text{ J/mol} \Rightarrow P_{\text{CO}_2} = 0,231 \text{ atm}$

- Hva er det som gir at $K=1$?

- Har beregnet ΔG° på flere ulike måter og får ikke rett svar...

Med $K=1$, $P_{\text{CO}_2} = 0,382 \text{ atm}$