





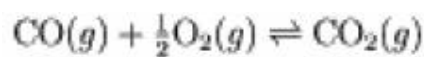
کد درس: 3.00 مقطع آموزشی: -	 عنوان درس:	  
استاد مدرس دانشگاه MIT W.C.Carter : استاد مترجم دانشگاه شهید بهشتی: مازیار یغمایی	ترمودینامیک مواد عنوان بخش:	معاونت فناوری اطلاعات و ارتباطات پروژه مشترک دانشگاه شهید بهشتی و دانشگاه MIT

ترمودینامیک مواد 3.00

نمونه سؤال هفته نهم

نمونه سؤال 9.1

برای واکنش



(a) برای فشار جزئی اکسیژن در تعادل عبارت کلی بنویسید. P_{O_2} از مفهوم ثابت تعادل و رابطه آن با انرژی آزاد واکنش $\Delta \bar{G}_{\text{reac}}$ استفاده کنید.

(b) برای نسبت ثابتی از $P_{\text{CO}_2}/P_{\text{CO}}$ منحنی ترسیم کنید که رابطه بین P_{O_2} ، P_T و همچنین P_{O_2} و T را نشان دهد.

(c) برای یک واکنش کلی که با $n_{\text{CO}}^0, n_{\text{O}_2}^0$ و $n_{\text{CO}_2}^0$ مول از مواد واکنش دهنده شروع می شود، عبارتی برای ثابت واکنش بر حسب تعداد مول O_2 و X بنویسید.



جواب 9.1

(a) ثابت واکنش برای یک واکنش به خصوص را می توان بر حسب عباراتی از فشار جزئی و فشار کل در تعادل نوشت. فرض کنید سیستم بسته است.

$$K = \frac{(P_{\text{CO}_2}/P_T)}{(P_{\text{CO}}/P_T)(P_{\text{O}_2}/P_T)^{\frac{1}{2}}}$$

$$K = \frac{P_{\text{CO}_2} P_T^{\frac{1}{2}}}{P_{\text{CO}} P_{\text{O}_2}^{\frac{1}{2}}}$$

رابطه ای بین ثابت تعادل واکنش و ΔG_{rxn} وجود دارد.

کد درس: 3.00 مقطع آموزشی: -	عنوان درس:  ترمودینامیک مواد عنوان بخش:	
استاد مدرس دانشگاه MIT W.C.Carter استاد مترجم دانشگاه شهید بهشتی: مازیار یغمایی		معاونت فناوری اطلاعات و ارتباطات پروژه مشترک دانشگاه شهید بهشتی و دانشگاه MIT

$$K = \exp\left(\frac{-\Delta\bar{G}_{rxn}}{RT}\right)$$

$$\frac{P_{CO_2} P_T^{\frac{1}{2}}}{P_{CO} P_{O_2}^{\frac{1}{2}}} = \exp\left(\frac{-\Delta\bar{G}_{rxn}}{RT}\right)$$

Rearranging we get:

$$P_{O_2} = \left(\frac{P_{CO_2}}{P_{CO}}\right)^2 P_T \exp\left(\frac{2\Delta\bar{G}_{rxn}}{RT}\right)$$

(b) رابطه خطی بین P_{O_2} و P_T را از روابط بالا با شیب m و عرض از مبدأ b را در زیر مشاهده می کنیم.

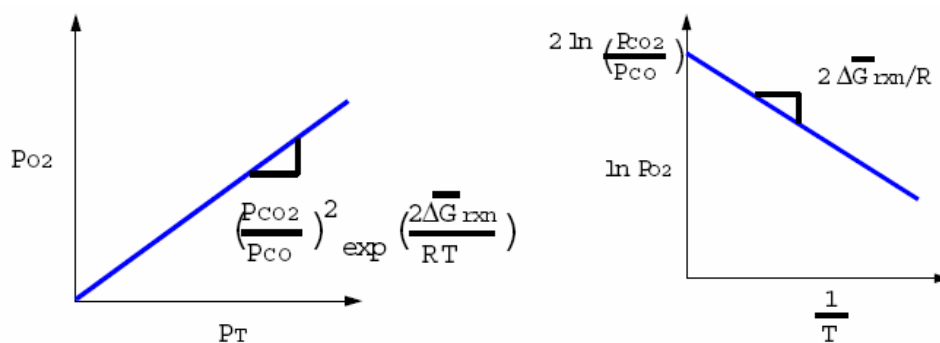
$$m = \left(\frac{P_{CO_2}}{P_{CO}}\right)^2 \exp\left(\frac{2\Delta\bar{G}_{rxn}}{RT}\right)$$




$b = 0$

با گرفتن \log طبیعی از هر دو طرف بالا، رابطه بین $\ln P_{O_2}$ و $\frac{1}{T}$ را مشاهده می کنیم.

$$\ln P_{O_2} = 2 \ln \frac{P_{CO_2}}{P_{CO}} + \frac{2\Delta\bar{G}_{rxn}}{R} \frac{1}{T}$$

در این شکل شیب برابر $\frac{2\Delta\bar{G}_{rxn}}{R}$ و عرض از مبدأ برابر $2 \ln \frac{P_{CO_2}}{P_{CO}}$ و شیب منفی است چون $\Delta\bar{G}_{rxn} < 0$.



کد درس: 3.00 مقطع آموزشی: -	 عنوان درس:	 دوره های آزاد رایانه ای SBU-MIT OCW Joint Project 
استاد مدرس دانشگاه MIT W.C.Carter استاد مترجم دانشگاه شهید بهشتی: مازیار یغمایی	ترمودینامیک مواد عنوان بخش:	معاونت فناوری اطلاعات و ارتباطات پروژه مشترک دانشگاه شهید بهشتی و دانشگاه MIT

(c) فرض کنید که گاز مانند مخلوط گاز ایده آل عمل کند. ثابت تعادل واکنش را می توان در جمله های کسر مولی هر گاز بنویسیم. اما در ابتدا مجبوریم مقدار تعادلی هر ماده را بیابیم. جدول زیر مقادیر معلوم را نشان می دهد.

reaction	CO	$\frac{1}{2}O_2$	\rightleftharpoons	CO ₂
initial	n_{CO}^0	$n_{O_2}^0$		$n_{CO_2}^0$
change	.	.		.
equilibrium	.	x		.

تغییر در تعداد مول اکسیژن برابر است با $x - n_{O_2}^0$. با استفاده از این رابطه می توانیم تعداد مول CO و CO₂ را به ترتیب با استفاده از $dn_{CO}^0 = 2dn_{O_2}^0$ و $dn_{CO_2}^0 = -2dn_{O_2}^0$ به دست آوریم. اکنون می توانیم باقیمانده جدول را پر کنیم.




reaction	CO	$\frac{1}{2}O_2$	\rightleftharpoons	CO ₂
initial	n_{CO}^0	$n_{O_2}^0$		$n_{CO_2}^0$
change	$2(x - n_{O_2}^0)$	$(x - n_{O_2}^0)$		$-2(x - n_{O_2}^0)$
equilibrium	$n_{CO}^0 + 2(x - n_{O_2}^0)$	x		$n_{CO_2}^0 - 2(x - n_{O_2}^0)$

ثابت تعادل را می توان بدین شکل نوشت:

$$K = \frac{\frac{n_{CO_2}^0}{n_T}}{\frac{n_{CO}^0}{n_T} \left(\frac{n_{O_2}^0}{n_T}\right)^{\frac{1}{2}}}$$

$$K = \frac{n_{CO_2}^0 n_T^{\frac{1}{2}}}{n_{CO}^0 (n_{O_2}^0)^{\frac{1}{2}}}$$

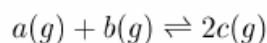
تعداد کل مول های مواد گازی در طول واکنش تغییر می کنند. استفاده از تعداد کل مول های مواد گازی در تعادل برای تعیین ثابت تعادل واکنش مهم است، $n_T = n_{CO_2}^0 + n_{CO}^0 + x$.

کد درس: 3.00 مقطع آموزشی: -	 عنوان درس:	 دوره های آزاد رایانه ای SBU-MIT OCW Joint Project 
استاد مدرس دانشگاه MIT W.C.Carter : استاد مترجم دانشگاه شهید بهشتی: مازیار یغمایی	ترمودینامیک مواد عنوان بخش:	معاونت فناوری اطلاعات و ارتباطات پروژه مشترک دانشگاه شهید بهشتی و دانشگاه MIT

$$K = \frac{(n_{\text{CO}_2}^0 - 2(x - n_{\text{O}_2}^0))(n_{\text{CO}_2}^0 + n_{\text{CO}}^0 + x)^{\frac{1}{2}}}{(n_{\text{CO}}^0 + 2(x - n_{\text{O}_2}^0))x^{\frac{1}{2}}}$$

9.2 نمونه سؤال

با استفاده از مقادیر داده شده ی $\bar{H}_{c,298}$, $\bar{H}_{a,298}$, $\bar{H}_{b,298}$ و ظرفیت های گرمایی ثابت تعادل واکنش برای واکنش زیر در دمای اختیاری T را محاسبه کنید.



9.2 جواب

ثابت واکنش با انرژی آزاد گیبس مولی $\Delta\bar{G}_{rxn}$ دارای چنین رابطه ای می باشد.

$$K = \exp\left(\frac{-\Delta\bar{G}_{rxn}}{RT}\right) = \left(\frac{n_c^2}{n_a n_b}\right)$$

Now we can formulate $\Delta\bar{G}_{rxn}$.

$$\Delta\bar{G}_{rxn} = 2\bar{G}_c - \bar{G}_b - \bar{G}_a$$

$$\Delta\bar{G}_{rxn} = 2\bar{G}_{c,298} - \bar{G}_{b,298} - \bar{G}_{a,298} + (2\Delta\bar{G}_c - \Delta\bar{G}_a - \Delta\bar{G}_b)$$

Now we can use $\bar{C}_{p,i}$ to calculate $\Delta\bar{G}_i$.

$$\Delta\bar{G}_{rxn} = (2\bar{H}_{c,298} - \bar{H}_{b,298} - \bar{H}_{a,298})$$

$$- 298(2\bar{S}_{c,298} - \bar{S}_{b,298} - \bar{S}_{a,298})$$

$$+ (2 \int_{298}^T \bar{C}_{p,c} dT - \int_{298}^T \bar{C}_{p,a} dT - \int_{298}^T \bar{C}_{p,b} dT)$$

$$- T(2 \int_{298}^T \frac{\bar{C}_{p,c}}{T} dT - \int_{298}^T \frac{\bar{C}_{p,a}}{T} dT - \int_{298}^T \frac{\bar{C}_{p,b}}{T} dT)$$

$$\Delta\bar{G}_{rxn} = (2\bar{H}_{c,298} - \bar{H}_{b,298} - \bar{H}_{a,298})298(2\bar{S}_{c,298} - \bar{S}_{b,298} - \bar{S}_{a,298})$$

$$+ \int_{298}^T (2\bar{C}_{p,c} - \bar{C}_{p,a} - \bar{C}_{p,b}) dT - T \int_{298}^T \frac{2\bar{C}_{p,c} - \bar{C}_{p,a} - \bar{C}_{p,b}}{T} dT$$

The substitution is straightforward.