

# NTS2: Natur, Technik, Systeme

## Test 1, April 2015

Zweites Semester WI13t

---

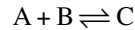
Erlaubte Hilfsmittel: **Bücher, persönlich verfasstes Journal und Zusammenfassung.** Rechen- und Schreibzeugs.

Antworten müssen begründet und nachvollziehbar sein.

Dauer der Prüfung: 60 Minuten.

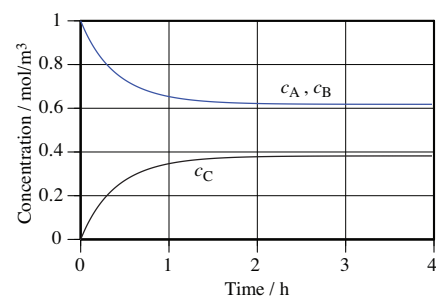
### Reaktion eines Giftes zu einem harmlosen Stoff

In einem Kubikmeter Wasser ist 1.0 mol eines Giftes (Atoff A) gelöst. Man gibt 1.0 mol eines zweiten Stoffes (Stoff B) hinzu, der mit A reagiert und den unschädlichen Stoff C nach der unvollständigen Reaktionsgleichung



bildet. Die Reaktionsrate hat eine Ratenkonstante (Geschwindigkeitskonstante)  $k$  und eine Gleichgewichtskonstante  $\mathcal{K}$ . Die Hinreaktion  $A+B$  ist proportional zu den Konzentrationen  $c_A$  und  $c_B$ , und die Rückreaktion ist proportional zu  $c_C$ .

- Formulieren Sie die Bilanzgleichungen für die Stoffmengen  $n_A$ ,  $n_B$  und  $n_C$ . [1 P.]
- Formulieren Sie die Gleichung für die Reaktionsrate von Stoff A. Wie hängen die Reaktionsraten von B und C von dieser ab? [1 P.]
- Formulieren Sie die Gleichungen für die Änderungsraten der drei Konzentrationen, d.h. für  $dc_A/dt$ ,  $dc_B/dt$ ,  $dc_C/dt$ . [2 P.]
- Im nebenstehenden Diagramm ist das Simulationsresultat für das dynamische Modell der Reaktion für  $V = 1.0$ ,  $k = 1$ ,  $\mathcal{K} = 1$ ,  $n_A(0) = 1$ ,  $n_B(0) = 1$ ,  $n_C(0) = 0$  gegeben (Grundeinheiten: h, mol,  $m^3$ ). Lesen Sie die Gleichgewichtskonzentrationen und die Änderungsraten bei  $t = 0$  h für alle drei Konzentrationen aus dem Diagramm (Vergrößerung auf nächster Seite). Berechnen Sie dann diese Werte theoretisch mit Hilfe Ihrer Modellgleichungen und vergleichen Sie die Resultate. [3 P.]



- e. Formulieren Sie alle Bedingungen für beliebige Werte von  $V$ ,  $k$ ,  $\mathcal{K}$ ,  $c_A(0)$  und  $c_B(0)$  (aber  $c_C(0) = 0$ ), die Sie brauchen, um die Gleichgewichtskonzentrationen  $c_A^{eq}$ ,  $c_B^{eq}$ ,  $c_C^{eq}$  berechnen zu können. [1 P.]
- f. Beweisen Sie, dass die Gleichgewichtskonzentration  $c_A^{eq}$  so berechnet wird [2 P.]:

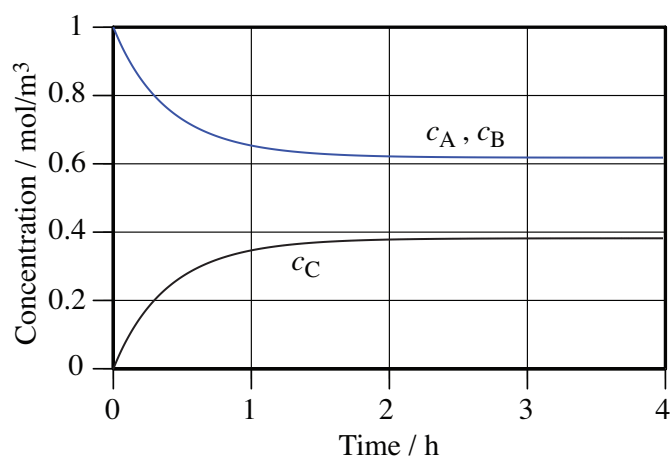
$$c_A^{eq} = \frac{-\left(1 + \mathcal{K}(c_B(0) - c_A(0))\right) + \sqrt{\left[1 + \mathcal{K}(c_B(0) - c_A(0))\right]^2 + 4\mathcal{K}c_A(0)}}{2\mathcal{K}}$$

- g. Lohnt es sich, mehr vom Stoff B als von A in die Lösung hinzugeben (zum Beispiel 2 mol). Wird dann bis zum Gleichgewicht mehr vom Gift A zerstört? Oder gleich viel? Oder weniger? Nehmen Sie Parameterwerte wie in Aufgabe d, aber  $n_B(0) = 2$ . [1 P.]
- h. Lohnt es sich, das Gift und den Stoff B stärker zu verdünnen? Nehmen Sie konkret die Parameterwerte wie in Aufgabe c, aber setzten Sie  $V = 2$ . Wird ein grösserer, gleicher oder kleinerer *Prozentsatz* von A vernichtet? [1 P.]
- i. Stellen Sie sich nun vor, dass der entstehende Stoff C während der Reaktion aus der Lösung ausgewaschen wird. Nehmen Sie speziell an, dass der Abfluss von C proportional zu  $c_C$  ist:

$$I_{n,C} = -G_n c_C$$

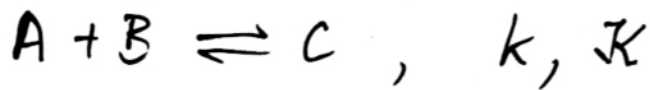
Formulieren Sie die neuen Differentialgleichungen für  $dc_A/dt$ ,  $dc_B/dt$ ,  $dc_C/dt$ . [2 P.]

- j. Lohnt es sich, den Stoff C aus dem Reaktionsvolumen zu entfernen? Geben Sie eine qualitative Begründung. [1 P.]



# NTS 2 W1131 Test 1

---



$$a. \quad \frac{dn_A}{dt} = \pi_{nA}, \quad \frac{dn_B}{dt} = \pi_{nB}, \quad \frac{dn_C}{dt} = \pi_{nC}$$

$$b. \quad \pi_{nA} = V k (c_c - K c_A c_B)$$

$$\pi_{nB} = \pi_{nA}, \quad \pi_{nC} = -\pi_{nA}$$

$$c. \quad \frac{d}{dt}(V c_A) = V k (c_c - K c_A c_B)$$

$$\rightarrow \frac{dc_A}{dt} = k (c_c - K c_A c_B)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = k (c_c - K c_A c_B)$$

$$\frac{dc_c}{dt} = -k (c_c - K c_A c_B)$$

$$d. \quad t=0: \quad \dot{c}_A(0) = 1 \cdot (0 - 1 \cdot 1 \cdot 1) \frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \cdot \text{h}} = -1.0 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \cdot \text{h}}$$

$$\dot{c}_B(0) = -1.0 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \cdot \text{h}}, \quad \dot{c}_c(0) = +1 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \cdot \text{h}}$$

$$t \rightarrow \infty: (1) \quad k (c_c^{eq} - K c_A^{eq} \cdot c_B^{eq}) = 0 \quad (\text{general})$$

$$(2) \quad c_B^{eq} = c_A^{eq}$$

$$(3) \quad c_c^{eq} = 1 - c_A^{eq}$$

$$\left. \begin{array}{l} (2) \\ (3) \end{array} \right\} \begin{array}{l} (\text{for } c_A(0) = c_B(0) = 1 \\ c_c(0) = 0) \end{array}$$

Insert (2) and (3) in (1) :

$$C_c^{eq} - K C_A^{eq} C_B^{eq} = 0$$

$$1 - C_A^{eq} - K(C_A^{eq})^2 = 0$$

$$C_A^{eq} = \frac{1 \pm \sqrt{1 + 4K \cdot 1}}{2 \cdot K} \Rightarrow$$

$$C_A^{eq} = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1) \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} = 0.618 \text{ mol/m}^3$$

$$C_B^{eq} = 0.618 \text{ mol/m}^3, \quad C_c^{eq} = 0.382 \text{ mol/m}^3$$

Theoretical values correspond to those in the diagrams

e. (1)  $C_c^{eq} - K C_A^{eq} \cdot C_B^{eq} = 0$

(2)  $C_B^{eq} = C_B(0) - C_A(0) + C_A^{eq}$

(3)  $C_c^{eq} = \frac{C_c(0) + C_A(0) - C_A^{eq}}{\uparrow = 0 !}$

f. Insert (2) and (3) in (1) :

$$C_A(0) - C_A^{eq} - K \cdot C_A^{eq} \cdot (C_B(0) - C_A(0) + C_A^{eq}) = 0$$

Solve ....

(3)

$$C_A(0) - C_A^{eq} - K C_A^{eq} (C_B(0) - C_A(0)) - K \cdot C_A^{eq 2} = 0$$

$$K C_A^{eq 2} + (K(C_B(0) - C_A(0)) + 1) C_A^{eq} - C_A(0) = 0$$

$$C_A^{eq} = \frac{-(K(C_B(0) - C_A(0)) + 1) \pm \sqrt{[K(C_B(0) - C_A(0)) + 1]^2 + 4K C_A(0)}}{2K}$$

$$= \frac{1}{2K} \left[ -[1 + K(C_B(0) - C_A(0))] + \sqrt{[K(C_B(0) - C_A(0)) + 1]^2 + 4K C_A(0)} \right]$$

$$g. C_A^{eq} = \frac{1}{2} \left[ -[1 + 2 - 1] + \sqrt{2^2 + 4} \right] = 0.41 \text{ mol/m}^3$$

This is less than in the standard case. It is worth using more B.

$$h. C_A^{eq} = \frac{1}{2} \left[ -[1 + 0] + \sqrt{1 + 4 \cdot 1 \cdot 0.5} \right] = 0.366 \text{ mol/m}^3$$

$C_A(0) = 0.5 \text{ mol/m}^3 \Rightarrow$  Only 27% of A has been used up. It is not worth diluting.

$$i. \dot{C}_A = k(C_c - K C_A C_B), \quad \dot{C}_B = k(C_c - K C_A C_B)$$

$$\dot{C}_c = -k(C_c - K C_A C_B) - \frac{G_A}{V} C_c$$

j. If we keep removing C,  $C_c$  will be generally smaller and therefore  $|\dot{C}_A|$  generally larger! In the end, all A will have reacted!