

Tentamen, Termodynamik och ytkemi, KFKA01, 2015-10-28

Tillåtna hjälpmedel: Miniräknare, utdelat formelblad.

Slutsatser skall motiveras och beräkningar redovisas. Tag för vana att alltid göra en rimlighetsbedömning.

För godkänt krävs minst 30 poäng.

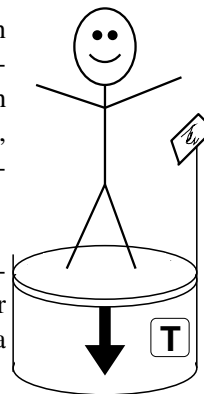
Den som bara ska omtentera termodynamikdelen gör uppgift 1–7. Skrivtiden är då 4 timmar och för godkänt krävs minst 21 poäng.

- En gastub med volymen 10.0 liter innehåller syrgas vid trycket 100 atm och temperaturen 25°C. Hur stor volym upptog gasen innan den komprimerades, d.v.s. vid 1 atm och temperaturen 25°C? Antag att syrgas följer van der Waals gasekvation med $a = 0,138 \text{ J m}^3 \text{ mol}^{-2}$ och $b = 3,17 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$.
 - Varför går det inte att kondensera syrgas vid denna temperatur oavsett hur mycket man komprimerar den.
 - Hur högt tryck behövs för att syrgas ska kondensera vid 100 K? Kokpunkten vid 1 atm är 90 K och ångbildningsentalpin är 6,8 kJ/mol. (6 p)

- Inspirerad av kursen uppfinner du en personvåg (se bilden) som består av en luftfylld cylinder med en termometer inuti.

Cylinderns basarea är 0,040 m². Locket är rörligt och både friktionen och lockets massa kan försummas. Vidare antar vi att ingen värme överförs mellan luften och de omgivande cylinderväggarna. Luftens värmekapacitet, $C_{V,m} = 21 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$, kan antas vara oberoende av temperaturen.

Innan du ställer dig på vågen är trycket inne i cylindern lika stort som utanför, 1 bar, och luftens temperatur är T_1 . När du stiger på vågen *försiktigt* (så att processen kan antas vara reversibel) ändras temperaturen till T_2 .



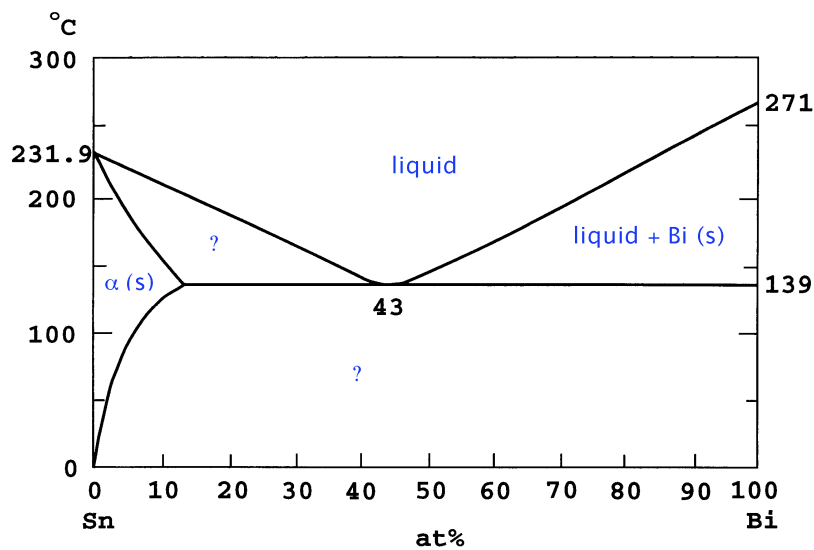
- Du har kopplat termometern till en mikroprocessor med display och det återstår nu bara att programmera hur många kg vågen ska visa utifrån de två mätvärdena T_1 och T_2 (angivna i Kelvin). Skriv en explicit formel för detta:

$$m = \dots \text{ kg}$$

(där högerledet inte innehåller andra variabler än T_1 och T_2)

- Om du istället *hoppar* upp på vågen, kommer den då att visa för mycket eller för lite? Motivera svaret.

(6 p)



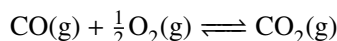
3. Figuren ovan visar fasdiagrammet för en legering av tenn (Sn) och vismut (Bi). På x-axeln finns molbråket för Bi i procent.
- Namnge de två fälten markerade med frågetecken på samma sätt som de övriga fälten.
 - Sådana här legeringar används exempelvis för lödning, och då är det viktigt att den smälter vid en väldefinierad temperatur (alltså inte i ett temperaturintervall). Vilken sammansättning bör man då ha och vad är smältpunkten för denna?
 - Om en legering med 20 mol% Bi upphettas till 150°C består systemet av en vätskefas och en fast fas. Uppskatta sammansättningen (mol% Bi) för var och en av dessa faser ur diagrammet. Vilken fas finns det mest av?
 - Om upphettningen fortsätter kommer en av faserna gradvis försvinna. Vilken fas gäller detta och vid vilken temperatur försvinner den helt.
 - Gör en grov uppskattning av smältentalpin för vismut ur diagrammet genom att utnyttja formeln för fryspunktssänkning (observera att temperaturskalan i diagrammet är i °C.)

På deluppgift a–d krävs endast svar, men på deluppgift e ska du redovisa dina beräkningar. (6 p)

4. Hexadekan smälter vid 71,2°C. Smältentalpin är 61,3 kJ mol⁻¹ vid smältpunkten. Värmekapaciteten för vätskan är $C_{p,m}(l) = 653 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ och för den fasta fasen $C_{p,m}(s) = 502 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.
- Beräkna entropiändringen för hexadekan då 1 mol hexadekan övergår till fast fas vid smältpunkten och förklara molekylärt varför tecknet blir som det blir (positivt eller negativt).
 - Beräkna entropiändringen för hexadekan då 1 mol underkyld hexadekan övergår till fast fas vid 60°C.

(6 p)

5. För reaktionen



gäller

$$\Delta_r G^\ominus(2000 \text{ K}) = -110,3 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta_r H^\ominus(2000 \text{ K}) = -277,9 \text{ kJ mol}^{-1}$$

- Beräkna jämviktssammansättningen (molbråken x_{CO} och x_{CO_2}) vid 2000 K och totaltrycket 1 bar om molbråket $x_{\text{O}_2} = 0,01$.
- Visa att en ökning av totaltrycket vid konstant temperatur ger ökat utbyte (mer CO_2). Du kan fortfarande anta att $x_{\text{O}_2} = 0,01$.
- Måste man öka eller minska temperaturen för att få ökat utbyte vid konstant tryck?

(6 p)

6. I tabellen nedan ges molbråket metylbensen (kallad ämne A) i vätskefas (x_A) och ångfas (y_A) tillsammans med totala ångtrycket p över metylbensen-butanon-blandningar med olika metylbensenhalt. Jämvikt råder vid 303,15 K.

x_A	0	0,0898	0,2476	0,3577	0,5194	0,6036
y_A	0	0,0410	0,1154	0,1762	0,2772	0,3393
p/kPa	36,066	34,121	30,900	28,626	25,239	23,402

x_A	0,7188	0,8019	0,9105	1
y_A	0,4450	0,5435	0,7284	1
p/kPa	20,6984	18,592	15,496	12,295

- Vad är ångtrycken för de rena ämnena metylbensen och butanon vid den aktuella temperaturen?
- Beräkna aktiviteten och aktivitetsfaktorn för metylbensen i vätskefas vid molbråket $x_A = 0,5194$.
- Uppskatta Henrys konstant för butanon i metylbensen vid den aktuella temperaturen.

(6 p)

7. I en elektrokemisk cell består anoden av ett zinkbleck i en 0,1 M ZnCl_2 -lösning och katoden av ett silverbleck i en 0,1 M AgNO_3 -lösning. Vid 298 K är cellspänningen 1,532 V och vid 308 K är cellspänningen 1,521 V.

- Skriv reaktionsformeln för reaktionen som sker om kretsen sluts.
- Beräkna ΔG^\ominus för reaktionen vid 298 K, där standardtillståndet för joner som vanligt betecknar idealt utspädd lösning med konc. 1 M.
- Beräkna ΔS^\ominus för reaktionen.

Båda lösningarna får antas vara idealt utspädda. ΔS^\ominus och ΔH^\ominus får antas vara oberoende av temperaturen.

(6p)

Ytkemi

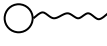
8. Vid temperaturen för nedanstående experiment, 25°C, har bensen ytspänningen 29,0 mN/m mot luft, densiteten 0,88 g/cm³ och ångtrycket 97 torr. Kontaktvinkeln för en droppe bensen på glas är 48°. Molmassan är 78,12 g/mol.

- Beräkna kapillärstigningen för bensen i ett glasrör med radien 0,80 mm.
- I ett moln av bensendroppar (en så kallad vätske-aerosol) uppmättes ett partialtryck av bensen på 104 torr. Beräkna dropparnas radie om de antas vara sfäriska och lika stora.
- Beräkna ändringen i Gibbs energi (per mol bensen) för processen då de små dropparna i uppgift *b* slår ihop sig till en enda stor "jättedroppe". Är processen spontan?

(6 p)

9. Tabellen nedan visar hur ytspänningen för en vattenlösning av en nonjonisk surfaktant varierar med koncentrationen. Temperaturen är 298 K.

[surfaktant] / mM	Ytspänning / (mN/m)
0.02	40.2
0.03	37.6
0.05	33.6
0.07	31.5
0.10	31.4
0.15	31.4

- Rita en enkel skiss av en micell. Rita varje molekyl ungefär så här:  där cirkeln är den hydrofila delen och svansen är den hydrofoba delen av molekylen.
- Uppskatta den kritiska micellbildningskoncentrationen (*cmc*) ur givna data.
- Om man skulle ta en annan surfaktant med samma hydrofila del men med en längre hydrofob kolkedja, hur skulle *cmc* ändras och varför?
- I koncentrationsintervallet 0,02 . . . 0,07 mM kan du anta att ytöverskottet (adsorptionen) är konstant. Beräkna ytöverskottet ur givna data. Använd flera datapunkter för att få en noggrann uppskattning.

(6 p)

10. Till en 5,0 mM NaCl-lösning med $\epsilon_r = 78,5$ tillsätts fasta partiklar av ett visst material. Den lokala koncentrationen av natriumjoner vid partiklarnas yta blir då 3,2 mM. Temperaturen är 298 K.

- Är ytan positivt eller negativt laddad?
- Beräkna den elektrostatiske potentialen vid ytan.
- Om två partiklar med sådana ytor kommer tillräckligt nära varandra repellerar de varandra. Ungefär på vilket avstånd kommer denna repulsion bli betydande? Motivera med beräkning.
- Välj rätt ord i de tre parenteserna i följande mening: Om du vill få partiklarna att aggregera, d.v.s. slå ihop sig, behöver du (**öka** / **minska**) repulsionen. Detta kan du exempelvis göra genom att (**öka** / **minska**) saltkoncentrationen eller (**öka** / **minska**) temperaturen.

(6 p)