

```
> restart;
> Digits:=30: interface( displayprecision=5 );
```

### Aufgabe

Ein Gasmisch aus den Volumenanteilen von 10 % SO<sub>2</sub> und 90 % O<sub>2</sub> wird bei 570 °C zur Reaktion gebracht. Dabei werden 80 % des SO<sub>2</sub> zu SO<sub>3</sub> oxidiert.

Wie groß ist K<sub>p</sub> für die Reaktion:  $2 \text{SO}_2 (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{SO}_3 (\text{g})$  wenn der Gesamtdruck 1 bar beträgt?

### Rechenweg

Annahmen:

- Alle drei Komponenten können mit der idealen Gasgleichung beschrieben werden.
- Die Volumenteile vor dem Mischen habe gleiche Temperatur T und gleichen Druck p.

Das Gesamtvolumen wird mit V bezeichnet.

Volumen SO<sub>2</sub> vor dem Mischen

```
> v[SO2] = 0.1*v;
```

$$V_{\text{SO}_2} = 0.1 V \quad (1)$$

Volumen O<sub>2</sub> vor dem Mischen

```
> v[O2] = 0.9*v;
```

$$V_{\text{O}_2} = 0.9 V \quad (2)$$

Das ideale Gasgesetz gilt für alle Komponenten. Druck p, Volumen V, Stoffmenge n, Temperatur T und allgemeine Gaskonstante R:

```
> p*v = n*R*T;
```

$$p V = n R T \quad (3)$$

```
> isolate ((3), n) ;
```

$$n = \frac{p V}{R T} \quad (4)$$

Die Gesamtstoffmenge nach dem Mischen vor der Reaktion wird mit N bezeichnet.

```
> subs (n=N, (4)) ;
```

$$N = \frac{p V}{R T} \quad (5)$$

Stoffmenge SO<sub>2</sub> vor der Reaktion

```
> subs (n=n[SO2], v=v[SO2], (4)) ;
```

$$n_{\text{SO}_2} = \frac{p V_{\text{SO}_2}}{R T} \quad (6)$$

```
> subs ( (1), (6) ) ;
```

$$n_{\text{SO}_2} = \frac{0.1 p V}{R T} \quad (7)$$

```
> subs ( rhs ((5))=lhs ((5)) , (7) ) ;
```

$$n_{\text{SO}_2} = 0.1 N \quad (8)$$

Stoffmenge O<sub>2</sub> vor der Reaktion

```
> subs (v[O2]=n[O2], v=N, (2)) ;
```

$$n_{\text{O}_2} = 0.9 N \quad (9)$$

Stoffmenge  $\text{SO}_3$  vor der Reaktion

>  $n[\text{SO}_3]=0;$

$$n_{\text{SO}_3}=0 \quad (10)$$

Bei der Reaktion wird 80% des  $\text{SO}_2$  entsprechend der gegebenen Reaktionsgleichung umgesetzt bis das Gleichgewicht erreicht ist.

Die Stoffmenge  $\text{SO}_2$  im Gleichgewicht

>  $n'[\text{SO}_2]=0.2*n[\text{SO}_2];$

$$n'_{\text{SO}_2}=0.2 n_{\text{SO}_2} \quad (11)$$

Einsetzen von (8).

>  $\text{subs}((8),(11));$

$$n'_{\text{SO}_2}=0.02 N \quad (12)$$

Die Stoffmenge  $\text{O}_2$  im Gleichgewicht

>  $n'[\text{O}_2] = n[\text{O}_2] - (n[\text{SO}_2]-n'[\text{SO}_2])/2;$

$$n'_{\text{O}_2}=n_{\text{O}_2}-\frac{n_{\text{SO}_2}}{2}+\frac{n'_{\text{SO}_2}}{2} \quad (13)$$

Einsetzen von (8) und (12).

>  $\text{subs}((8),(12),(13));$

$$n'_{\text{O}_2}=n_{\text{O}_2}-0.040000 N \quad (14)$$

Einsetzen von (9).

>  $\text{subs}((9),(14));$

$$n'_{\text{O}_2}=0.86000 N \quad (15)$$

Stoffmenge von  $\text{SO}_3$  im Gleichgewicht.

>  $n'[\text{SO}_3] = n[\text{SO}_3] + (n[\text{SO}_2]-n'[\text{SO}_2]);$

$$n'_{\text{SO}_3}=n_{\text{SO}_3}+n_{\text{SO}_2}-n'_{\text{SO}_2} \quad (16)$$

Einsetzen von (8), (10) und (12).

>  $\text{subs}((8),(10),(12),(16));$

$$n'_{\text{SO}_3}=0.08 N \quad (17)$$

Gesamtstoffmenge im Gleichgewicht

>  $N'=n'[\text{SO}_2]+n'[\text{O}_2]+n'[\text{SO}_3];$

$$N'=n'_{\text{SO}_2}+n'_{\text{O}_2}+n'_{\text{SO}_3} \quad (18)$$

Einsetzen von (12), (15) und (17).

>  $\text{subs}((12),(15),(17),(18));$

$$N'=0.96000 N \quad (19)$$

Umrechnen von den Stoffmenge  $n'$  auf die Partialdruck  $p'$  über die ideale Gasgleichung.

>  $\text{isolate}((3),p);$

$$p=\frac{n R T}{V} \quad (20)$$

Der Gesamtdruck  $P$  ist gegeben.

>  $\text{subs}(p=P,n=N',(20));$

$$P=\frac{N' R T}{V} \quad (21)$$

Die Umrechnung von Stoffmenge auf Partialdruck über Gesamtdruck und Gesamtstoffmenge durch Einsetzen in (20) oder direkt diese Formel als bekannt verwenden.

```
> subs( isolate((21),T) , (20) );
```

$$p = \frac{n P}{N'} \quad (22)$$

Partialdruck von SO<sub>2</sub> im Gleichgewicht

```
> subs( p=p'[SO2] , n=n'[SO2] , (22) );
```

$$p'_{SO_2} = \frac{n'_{SO_2} P}{N'} \quad (23)$$

Einsetzen von (12).

```
> subs((12),(23));
```

$$p'_{SO_2} = \frac{0.02 N P}{N'} \quad (24)$$

Partialdruck von O<sub>2</sub> im Gleichgewicht

```
> subs( p=p'[O2] , n=n'[O2] , (22) );
```

$$p'_{O_2} = \frac{n'_{O_2} P}{N'} \quad (25)$$

Einsetzen von (15).

```
> subs( (15),(25) );
```

$$p'_{O_2} = \frac{0.86000 N P}{N'} \quad (26)$$

Partialdruck von SO<sub>3</sub> im Gleichgewicht.

```
> subs( n=n'[SO3] , p=p'[SO3] , (22) );
```

$$p'_{SO_3} = \frac{n'_{SO_3} P}{N'} \quad (27)$$

Einsetzen von (17).

```
> subs( (17),(27) );
```

$$p'_{SO_3} = \frac{0.08 N P}{N'} \quad (28)$$

Das Massenwirkungsgesetz mit den Partialdrücken und Gleichgewichtskonstanten K<sub>p</sub> aufschreiben.

```
> K[p] = p'[SO3]^2/( p'[SO2]^2 * p'[O2] );
```

$$K_p = \frac{p_{SO_3}^2}{p_{SO_2}^2 p'_{O_2}} \quad (29)$$

Die Partialdrücke (24), (26) und (28) einsetzen.

```
> subs( (24),(26),(28),(29) );
```

$$K_p = \frac{18.605 N'}{N P} \quad (30)$$

Gesamtstoffmenge N' aus (19) einsetzen.

```
> subs( (19),(30) );
```

$$K_p = \frac{17.860}{P} \quad (31)$$

Der gegebene Gesamtdruck P = 1 bar.

```
> subs( P=1*Unit(bar) , (31) ); simplify(%);
```

$$K_p = \frac{17.860}{[bar]}$$

└

$$K_p = 0.00017860 \left[ \frac{1}{Pa} \right] \tag{32}$$