

3. Seix un volume fixo de 10m^3 con 2kmol de A e 1kmol de B segundo a RA $A_{(g)} + 2B_{(g)} \rightleftharpoons C_{(g)}$ a $T = 500\text{K}$ constantes que acaba o equilibrio a $10\text{atm} = 1013250\text{Pa}$

a) K_p, K_c ? b) se $\Delta T = 10\text{K}$ $K_c' = 2K_c$ dexa ou endo?

Escribimos a ecuación molar de cada componente: ($n_i = n_i^0 + \nu_i \xi$)

$$\left. \begin{aligned} n_A &= n_A^0 - \xi = 2000 - \xi \\ n_B &= n_B^0 - 2\xi = 1000 - 2\xi \\ n_C &= n_C^0 + \xi = \xi \end{aligned} \right\} \Rightarrow n_T = 3000 - 2\xi$$

Supoñendo gases ideais podemos asumir certa a leis das presións parciais de Dalton, o que nos permite calcular ξ no equilibrio como:

$$p_T V = n_T RT = (3000 - 2\xi) RT \Rightarrow \xi = \frac{p_T V}{2RT} + 1500 = 280,7\text{ mol}$$

$$\Rightarrow \text{no equilibrio} \left\{ \begin{aligned} n_A &= 1719,3\text{ mol} \Rightarrow C_A = 172\text{ mol/m}^3 \\ n_B &= 438,6\text{ mol} \Rightarrow C_B = 44\text{ mol/m}^3 \\ n_C &= 280,7\text{ mol} \Rightarrow C_C = 28\text{ mol/m}^3 \end{aligned} \right.$$

A LAM para as concentracións é:

$$K_c = \prod_i^{\nu_i} C_i^{\nu_i} = \frac{C_C}{C_A C_B^2} = \frac{28}{172 \cdot 44^2} = 2,35 \cdot 10^{-3} \text{ m}^6/\text{mol}^2$$

e aplicando a ecuación de Clapeyron:

$$K_p = (RT)^{\Delta \nu} K_c = \frac{K_c}{(RT)^2} = 1,36 \cdot 10^{-10} \text{ Pa}^2$$

b) Por definición da constante de equilibrio: Ecuación de Van't Hoff

$$\ln k_p = -\frac{\Delta \tilde{G}^\circ}{RT} \Rightarrow \left(\frac{\partial \ln k_p}{\partial T}\right)_p = -\left(\frac{\partial \Delta \tilde{G}^\circ / RT}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{R} \frac{\Delta \tilde{H}^\circ}{T^2}$$

→ Ecuación de Gibbs-Helmholtz

$$\left(\frac{\partial G/RT}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p + G \left(\frac{\partial T^{-1}}{\partial T}\right)_p = -\frac{S}{T} - \frac{G}{T^2} = \frac{-ST + G}{T^2} \stackrel{\substack{\text{Ecuación de Euler} \\ \text{transformada} \\ \text{de Legendre}}}{=} -\frac{M}{T^2}$$

Como dixemos antes $K_c = (RT)^{-\Delta \nu} k_p$

entón, $\ln K_c = \ln k_p + 2 \ln RT$

Calculamos a súa ecuación de Van't Hoff:

$$\left(\frac{\partial \ln K_c}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial \ln k_p}{\partial T}\right)_p + 2 \left(\frac{\partial \ln RT}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{R} \frac{\Delta \tilde{H}^\circ}{T^2} + \frac{2}{T}$$

integraremos entre k_c° e $2k_c^\circ$ e $T_1 = 500\text{K}$ e $T_2 = 510\text{K}$:

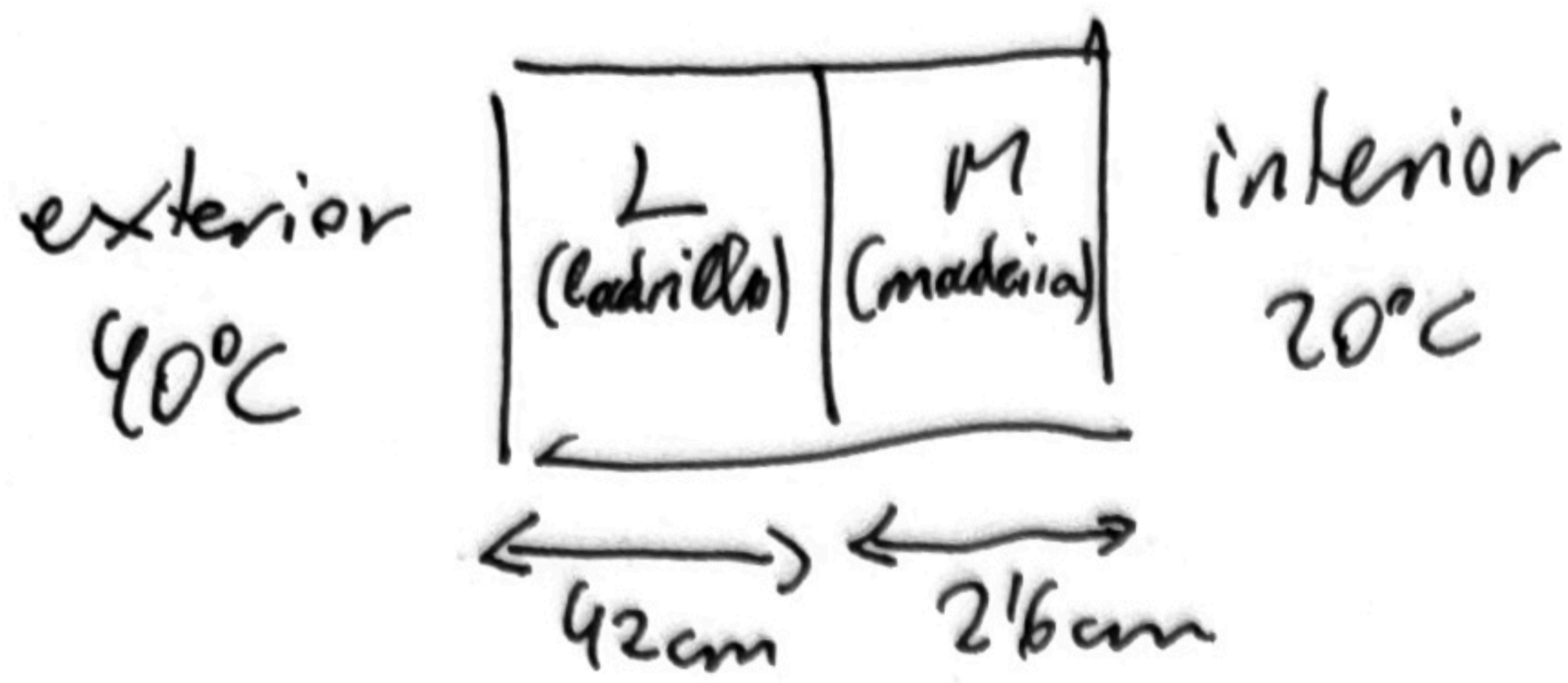
$$\ln(2K_c^\circ/k_c^\circ) = 2 \ln T_2/T_1 - \frac{\Delta \tilde{H}^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

$$\Rightarrow \Delta \tilde{H}^\circ = \frac{T_2 T_1 R}{T_1 - T_2} (2 \ln T_2/T_1 - \ln 2) = 138 \text{ kJ} > 0 \Rightarrow Q > 0$$

$\Delta \tilde{H} = (\Delta H)_p = Q$
 \Rightarrow RR endotérmica

Ecuación de Gibbs para G
 $dG = -SdT + Vdp \Rightarrow \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S$

4. Conducción de calor longitudinal por unha parede de dúas capas entre dous focos de temperatura



$$\kappa_L = 0.6 \frac{\text{kcal}}{\text{mh}^\circ\text{C}} = 0.6 \frac{\text{kcal}}{\text{mh}^\circ\text{C}} \cdot \frac{4.18 \text{ kJ}}{1 \text{ kcal}} \cdot \frac{1 \text{ h}}{60 \text{ min}} = 41.8 \text{ J/m}\cdot\text{min}\cdot^\circ\text{C}$$

$$\kappa_M = 0.13 \frac{\text{kcal}}{\text{mh}^\circ\text{C}} = 9 \text{ J/m}\cdot\text{min}\cdot^\circ\text{C}$$

Como consideramos só unha conducción longitudinal, $J_Q = J_Q(x)$

Ecuación de Fourier estacionaria: (non hai fenómeno térmico, sen cargas)

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = 0 = \nabla \cdot J_Q = -\kappa \nabla^2 T \Rightarrow \nabla^2 T = 0 \Rightarrow T(x) = ax + b$$

Como condicións de contorno

$$\frac{d^2 T}{dx^2} = 0$$

$$T_2(0) = 40^\circ\text{C} \underset{T_1}{=} ; T_M(0) = T' = T_M(0.42) \underset{L_1}{=} ; T_M(0.026) = 20^\circ\text{C} \underset{T_2}{=}$$

$$\Rightarrow T_2(0) = T_1 = b \Rightarrow T_2(L_1) = aL_1 + T_1 = T' \Rightarrow a = \frac{T' - T_1}{L_1}$$

$$\Rightarrow T_M(0) = T' = T_M(L_2) = cL_2 + T' = T_2 \Rightarrow c = \frac{T_2 - T'}{L_2}$$

$$T_2(x) = \frac{T' - T_1}{L_1} x + T_1$$

$$T_M(x) = \frac{T_2 - T'}{L_2} x + T'$$

→ como T' é a mesma para ambas as dúas despegamos esta en $J_{Q1} = J_{Q2} = -\kappa_i \nabla T_i = J_Q$

$$J_{Q1} = -\kappa_L \frac{T' - T_1}{L_1} = -\kappa_M \frac{T_2 - T'}{L_2} = J_{Qm} \Rightarrow T' - T_1 = \frac{\kappa_L L_1}{\kappa_M L_2} T_2 - \frac{\kappa_L L_1}{\kappa_M L_2} T'$$

$$T' = \frac{\frac{\kappa_L L_1}{\kappa_M L_2} T_2 + T_1}{1 + \frac{\kappa_M L_1}{\kappa_L L_2}} = 297.60 \text{ K} \quad \checkmark \text{ Ten Kelvin}$$

$$\Rightarrow J_Q = -\kappa_L \frac{T' - T_1}{L_1} = -\kappa_M \frac{T_2 - T'}{L_2} = +1547.6 \frac{\text{J}}{\text{m}^2 \cdot \text{min}}$$

J_Q ten que ser maior que cero xa que indica no sentido que se move o calor. Se definimos o sentido das x positivo, T diminúe, polo que o gradiente mengua e vai nesa dirección o fluxo