

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester ^{Kedua}~~Pertama~~
Sidang Akademik 1994/95

April 1995

EKC 104 - KIMIA FIZIKAL

Masa: [3 jam]

ARAHAN KEPADA CALON:

Sila pastikan kertas soalan ini mengandungi **SEPULUH** (10) muka surat bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Kertas ini mengandungi **LIMA** (5) soalan.

Jawab mana-mana **EMPAT** (4) soalan.

Soalan No. 1 **MESTI** dijawab dalam Bahasa Malaysia. Anda dibolehkan menjawab soalan-soalan lain dalam Bahasa Inggeris.

Soalan terjemahan Bahasa Inggeris ditaip dalam bentuk tulisan **Italic**.

..2/-

1. Wynkoop dan Wilhelm telah mengkaji kadar penghidrogenan etilena dengan menggunakan mangkin tembaga-magnesium oksida dengan tekanan yang terhad dan julat rencaman. Data mereka boleh ditafsirkan dengan menggunakan kadar ungkapan tertib pertama dalam bentuk:

Wynkoop and Wilhelm studied the rate of hydrogenation of ethylene, using a copper-magnesium oxide catalyst, over restricted pressure and composition ranges. Their data may be interpreted with a first-order rate expression of the form:

$$r = (k_1)_p P_{H_2} \quad \dots(A)$$

dimana r adalah kadar tindakbalas, dalam $\text{gmol}/(\text{cm}^3)(\text{s})$, dan P_{H_2} ialah tekanan setara hidrogen dalam atmosfera. Dengan persamaan kadar ini $(k_1)_p$ boleh dilaporkan dalam $\text{gmol}/(\text{cm}^3)(\text{s})(\text{atm})$. Jawapan untuk $(k_1)_p$ pada suhu yang berbeza diberikan di dalam Jadual 1.

where r is the rate of reaction, in $\text{g mol}/(\text{cm}^3)(\text{s})$, and P_{H_2} is the partial pressure of hydrogen, in atmospheres. With this rate equation $(k_1)_p$ will be reported in $\text{g mol}/(\text{cm}^3)(\text{s})(\text{atm})$. The results for $(k_1)_p$ at various temperatures are given in Table 1.

- [a] Apakah tenaga pengaktifan dari persamaan (A) dengan menggunakan kaedah grafik?

What is the activation energy from rate equation (A) using graphical method?

- [b] Apakah yang akan terjadi jika kadar persamaan ini diungkapkan dalam sebutan kepekatan hidrogen daripada dalam sebutan tekanan separa.

Nilai untuk $R = 1.985 \text{ kcal/kmol.K}$

What would it be if the rate equation were expressed in terms of the concentration of hydrogen rather than the partial pressure?

Value of $R = 1.985 \text{ kcal/kmol K}$

Jadual 1: Data untuk penghidrogenan etilena
Table 1 Data for hydrogenation of ethylene

Run	$(k_1)_p \times 10^5$ g mol/(s)(atm)(cm ³)	T (°C)	1/T x 10 ³ K ⁻¹
1	2.70	77	2.86
2	2.87	77	2.86
3	1.48	63.5	2.97
4	0.71	53.3	3.06
5	0.66	53.3	3.06
6	2.44	77.6	2.85
7	2.40	77.6	2.85
8	1.26	77.6	2.85
9	0.72	52.9	3.07
10	0.70	52.9	3.07
11	2.40	77.6	2.85
12	1.42	62.7	2.98
13	0.69	53.7	3.06
14	0.68	53.7	3.06
15	3.03	79.5	2.83
16	3.06	79.5	2.83
17	1.31	64.0	2.97
18	1.37	64.0	2.97
19	0.70	54.5	3.05
20	0.146	39.2	3.20
21	0.159	38.3	3.21
22	0.260	49.4	3.10
23	0.322	40.2	3.19
24	0.323	40.2	3.19
25	0.283	40.2	3.19
26	0.284	40.2	3.19
27	0.277	39.7	3.20
28	0.318	40.2	3.19
29	0.323	40.2	3.19
30	0.326	40.2	3.19
31	0.312	39.9	3.19
32	0.314	39.9	3.19
33	0.307	39.8	3.19

(25 markah)

..4/-

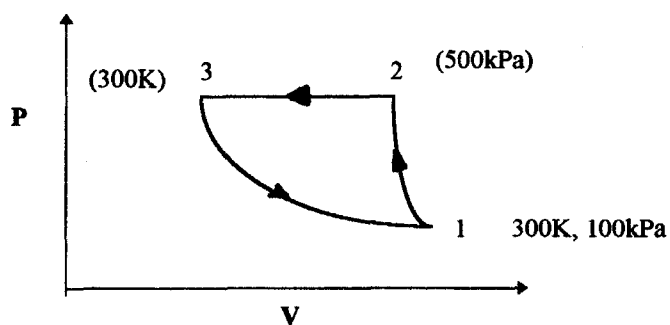
- 2 [a] Satu kmol gas unggul dengan $\gamma = 1.4$ dimampatkan berbalik dan adiabatik dari 100kPa dan 300K kepada 500kPa dan kemudiannya ia disejukkan pada tekanan malar ke suhu asal. Gas itu kemudiannya kembali ke tekanan mulanya iaitu pada 100 kPa dengan melalui proses berbalik dan sesuhu (isothermal).

Hitungkan saling tindak haba dan kerja untuk setiap proses. Tentukan yang nilai kerja berlaku oleh gas dan nilai tenaga yang dipindahkan sebagai haba kepada gas.

One kmol of an ideal gas with $\gamma = 1.4$ is compressed reversibly and adiabatically from 100 kPa and 300K to 500kPa and then is cooled at constant pressure to the original temperature. The gas is then restored to the initial pressure of 100kPa by following a reversible and isothermal process.

Calculate the heat and work interactions for each of the processes. Also determine the net work done by the gas and the net energy transferred as heat to the gas.

(15 markah)



$$R = 8.314 \text{ kJ/kmol K}$$

- [b] Anda dikehendaki untuk merekabentuk sebuah tangki untuk menyimpan 10 kmol methana pada 6MPa dan 300K. Tentukan saiz tangki itu dengan menggunakan:

It is desired to design a tank to store 10 kmol methane at 6 MPa and 300K. Determine the size of the tank using:

- [i] hukum Gas Unggul
the ideal gas law
- [ii] persamaan Van der Waals
Van der Waals equation of state.

Sifat-sifat genting methana (CH₄) ialah:
Critical properties of methane (CH₄):

$$T_c = 199.6 \text{ K}$$

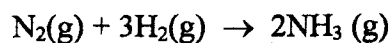
$$P_c = 4.60 \text{ MPa}$$

Nilai untuk R = 8.314 kJ/kmol.K
Value of R = 8.314 kJ/kmol K

(10 markah)

3. [a] Hitungkan perubahan piawai tenaga bebas Gibbs dan pemalar keseimbangan pada 298.15K dan 0.1 MPa untuk tindak balas berikut:

Calculate the standard Gibbs free energy change and the equilibrium constant at 298.15K and 0.1 MPa for the reaction:



(5 markah)

- [b] Apakah nilai pemalar keseimbangan untuk tindakbalas di atas pada 400°C dan 0.1MPa. Buat anggapan bahawa haba piawai untuk tindak balas ΔH° sebagai malar di dalam lingkungan julat suhu dari 25°C kepada 400°C

What is the value of equilibrium constant of above reaction at 400°C and 0.1 MPa. Assume that the standard heat of reaction ΔH° is constant in the temperature range 25°C to 400°C.

(7 markah)

- [c] Anggarkan perubahan piawai tenaga bebas Gibbs, ΔG° dan pemalar keseimbangan K pada 400°C dan 0.1 MPa untuk tindak balas di atas dengan menggunakan suhu sandaran daripada haba tindak balas.

Estimate the standard Gibbs free energy change, ΔG° and the equilibrium constant K at 400°C and 0.1 MPa for the above reaction using temperature dependence of the heat of reaction.

(10 markah)

- [d] Bezakan nilai K yang dihitung dalam bahagian (b) dan (c). Adakah didapati yang nilai K tersebut sama atau tidak?

Compare the value of K calculated from part (b) and (c). Do you find the value of K same or different?

(3 markah)

Data:

Keadaan molal muatan haba gas unggul pada tekanan malar N_2 , H_2 dan NH_3 diberikan oleh:

The ideal gas state molal heat capacities at constant pressure of N_2 , H_2 and NH_3 are given by:

$$\hat{C}_p^\circ(N_2) = (3.280 + 593 \times 10^{-3} T)R$$

$$\hat{C}_p^\circ(H_2) = (3.249 + 0.422 \times 10^{-3} T)R$$

$$\hat{C}_p^\circ(NH_3) = (3.578 + 3.020 \times 10^{-3} T)R$$

Dimana \hat{C}_p° ialah di dalam J/mol.K

$$R = 8.314 \text{ J/mol.K}$$

dan T dalam K

Where \hat{C}_p° is in J/mol.K

$$R = 8.314 \text{ J/mol.K}$$

and T in K

Haba piawai oleh pembentukan dan tenaga bebas Gibbs oleh ammonia.
Standard heat of formation and Gibbs free energy of ammonia:

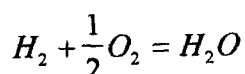
$$\Delta H_f^\circ \text{ for } NH_3(g) = -46.11 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G_{298}^\circ \text{ for } NH_3(g) = -16.45 \text{ kJ/mol}$$

4. Satu sel bahan api yang menggabungkan gas hidrogen tulen dan oksigen menggunakan satu elektrod bermangkin untuk mengeluarkan stim dan tenaga elektrik telah dirancang untuk digunakan dalam rancangan angkasa kita. Disebabkan oleh tindak balas yang lengkap diantara H_2 dan O_2 , stim yang dihasilkan semestinyalah tulen. Kajian permulaan menunjukkan yang sel akan berfungsi sebaiknya pada suhu 540°C dan pada tekanan 700 kPa. Tentukan nilai voltan berbalik sel ini.

A fuel cell that combines pure gaseous hydrogen and oxygen over a catalytic electrode to produce steam and electrical energy is planned for use in our space program. Because of complete reaction between the H_2 and O_2 the product steam is essentially pure. Initial studies indicate that the cell will operate satisfactorily at a temperature of $540^\circ C$ and a pressure of 700 kPa . Determine the reversible voltage of this cell.

Untuk tindak balas
For the reaction



At $25^\circ C$

Keadaan piawai pertukaran tindakbalas tenaga bebas Gibbs:
Standard state Gibbs free energy change of reaction:

$$\Delta G^\circ = -54,600 \frac{\text{cal}}{\text{gmol}}$$

Keadaan piawai pertukaran tindak balas entalpi:
Standard state enthalpy change of reaction:

$$\Delta H^\circ = -57,800 \frac{\text{cal}}{\text{gmol}}$$

Dimana keadaan piawai komponen adalah asli pada tekanan 1 atm . Dalam lingkungan julat suhu yang dikehendaki keupayaan haba purata di bawah boleh digunakan:

Where the standard states are pure components at 1 atm pressure. Over the temperature range of interest the following average heat capacities apply:

$$(Cp)_{H_2} = 7.15 \frac{\text{cal}}{\text{gmol} \cdot ^\circ K}$$

$$(Cp)_{O_2} = 8.00 \frac{\text{cal}}{\text{gmol} \cdot ^\circ K}$$

$$(Cp)_{H_2O} = 9.25 \frac{\text{cal}}{\text{gmol} \cdot ^\circ K}$$

$$\text{Value of } R = 1.987 \frac{\text{cal}}{\text{gmol} \cdot ^\circ K}$$

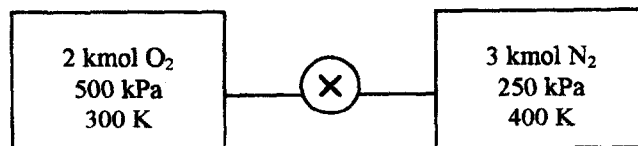
Molar Faraday $F = 23,068 \text{ cal/volt equivalent}$
 Semua gas boleh dianggapkan berkelakuan unggul

*Faraday constant $F = 23,068 \text{ cal/volt equivalent}$
 All gases may be assumed to behave ideally.*

(25 markah)

5. [a] Dua kmol oksigen 500 kPa dan 300K berada di dalam sebuah kontena tertebat yang disambungkan melalui injap ke sebuah lagi kontena (juga tertebat) dipenuhi oleh 3 kmol nitrogen pada 250kPa dan 400K. Injap itu dibuka dan percampuran adiabatik berlaku. Hitungkan pertukaran entropi untuk proses percampuran tersebut. Anggapkan yang nitrogen dan oksigen sebagai gas unggul.

Two kmol of oxygen 500 kPa and 300K is in an insulated container which is connected through a valve to a second container (also insulated) filled with 3 kmol of nitrogen at 250 kPa and 400K. The valve is opened, and adiabatic mixing takes place. Calculate the entropy change for the mixing process. Consider both nitrogen and oxygen as ideal gases.



..10/-

Data

Muatan Haba Purata
Average Heat Capacities

$$(\hat{C}_V)_{O_2} = 21.17 \text{ kJ / kmol K}$$

$$(\hat{C}_V)_{N_2} = 20.86 \text{ kJ / kmol K}$$

$$R = 8.314 \text{ kJ / kmol K}$$

(13 markah)

- [b] Entalpi dari bahan asli boleh dinyatakan sebagai fungsi dari dua pembolehubah tak bersandar P, v dan T. Terbitkan hasil bezaan separa dari entalpi di dalam sebutan dari harta yang boleh dinilai di mana pengetahuan membolehkan kita untuk menganggarkan perubahan di dalam entalpi bersekutu dengan perubahan di dalam pembolehubah tak bersandar.

The enthalpy of a pure substance can be expressed as a function of any 2 of the independent variables P, v and T. Derive the following partial derivatives of enthalpy in terms of the measurable properties whose knowledge enables us to estimate the change in the enthalpy associated with the change in the independent variables.

[i] $\left(\frac{\partial h}{\partial v} \right)_T$

[ii] $\left(\frac{\partial h}{\partial P} \right)_T$

[iii] $\left(\frac{\partial h}{\partial v} \right)_P$

(12 markah)

ooo0ooo