

化学工学量論 2012 伊東

4/10(火) 第1回 化学工学とは・単位と次元・単位換算法
 4/17(火) 第2回 データの取り扱い・グラフ
 4/24(火) 第3回 モデル解析の道具
 5/1(火) 第4回 物質収支
 5/8(火) 第5回 反応系の物質収支
 5/15(火) 第6回 プロセスの物質収支
 5/22(火) 第7回 理想気体と実在気体
 5/29(火) 第8回 蒸気圧と湿度
 6/5(火) 第9回 相平衡
 6/12(火) 第10回 熱力学第一法則・気体のエンタルピー
 6/19(火) 第11回 熱化学・生成熱・燃焼熱
 6/26(火) 第12回 反応熱・断熱反応温度
 ■7/3(火) 第13回 反応速度と平衡
 7/10(火) 第14回 非定常物質収支・エネルギー収支
 7/24(火) 第15回 熱および物質移動と湿球温度
 7/31(火) 期末試験

火曜 3,4 限(10:45-12:15) 講義室 S323
 演習: 情報ネットワーク演習室第2(E)(S4 3F)

毎回演習レポート(筆記および Excel プリントアウト)を課します。講義時間内に提出のこと。
 (講義時間内に提出できなかった場合のメ切は当日 17:00, 提出は南 1 421 伊東居室前の Box へ。)

演習・実習用の Excel シートテンプレートファイルは以下にあります。当日のフォルダ“bce_”をデスクトップにコピーして使ってください。

1. [エクスプローラ]
2. “¥¥nest2.g.gsic.titech.ac.jp¥¥home0”を入力
3. “usr2/ito-a-ac/”に入る

13回 反応平衡と反応速度

1 反応系の Gibbs エネルギーG と平衡定数 K

一般に i 成分の混合物の全ギブスエネルギー G は, n [mol]: 物質量, μ [kJ/mol]: 化学ポテンシャルとして次式である。^{1, p. 142)}

$$G = \sum n_i \mu_i \text{ [kJ]} \quad (1)$$

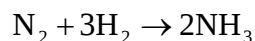
また, 完全気体の化学ポテンシャル μ は標準化学ポテンシャル μ° , と分圧 p により,

$$\mu_i = \mu_i^\circ + RT \ln(p_i / p_0) \quad (2)$$

である。^{1, p. 145)} ここで p_0 は基準圧力 ($p_0 = 1\text{bar} = 0.1\text{MPa}$) である。以上の関係は反応が生じている混合物にも適用できる。この基礎式により反応系のギブスエネルギーを具体的に求める。

【例題 1】反応系の反応進行度とギブスエネルギー <bce38.xls>

アンモニア生成反応:



を N_2 : 1 mol, H_2 : 3 mol, NH_3 : 0 mol の物質量から開始させる。温度 $T = 773\text{ K}$, 圧力 $p = 20\text{ MPa}$ の条件で, 反応進行度 ξ とギブスエネルギーの関係を示せ。

(解) 反応進行度 ξ のとき各成分の物質量 n_i [mol] は $n_{\text{N}_2} = (1 - \xi)$, $n_{\text{H}_2} = (3 - 3\xi)$, $n_{\text{NH}_3} = 2\xi$, 全物質量は $(4 - 2\xi)$ mol である。全圧 p のとき, 各成分の分圧 p_i は,

$$p_{\text{N}_2} = \frac{1 - \xi}{4 - 2\xi} p, p_{\text{H}_2} = \frac{3 - 3\xi}{4 - 2\xi} p, p_{\text{NH}_3} = \frac{2\xi}{4 - 2\xi} p$$

である。よってこの系のギブスエネルギー G は式(1), (2)から次式となる。

$$G = (1 - \xi)(\mu_{\text{N}_2}^\circ + RT \ln(p_{\text{N}_2} / p_0)) + (3 - 3\xi)(\mu_{\text{H}_2}^\circ + RT \ln(p_{\text{H}_2} / p_0)) + (2\xi)(\mu_{\text{NH}_3}^\circ + RT \ln(p_{\text{NH}_3} / p_0))$$

絶対値である標準化学ポテンシャル μ_i° の差は標準生成ギブスエネルギー $\Delta_f G_i^\circ$ (標準状態基準) の差で計算されるので, μ_i° を $\Delta_f G_i^\circ$ に置き換えることができ,

$$G = (1-\xi)(\Delta_f G_{\text{N}_2}^\circ + RT \ln(p_{\text{N}_2}/p_0)) + (3-3\xi)(\Delta_f G_{\text{H}_2}^\circ + RT \ln(p_{\text{H}_2}/p_0)) + (2\xi)(\Delta_f G_{\text{NH}_3}^\circ + RT \ln(p_{\text{NH}_3}/p_0))$$

である。標準生成ギブスエネルギー $\Delta_f G_i^\circ(T)$ は温度によるデータ²⁾が得られるし、標準温度における値 $\Delta_f G_i^\circ(298\text{ K})$ から計算できるので、この右辺は条件(温度, 圧力)が決まれば ξ 以外は定数である。したがってこの式により反応進行度 ξ による G の変化が求められる。例題の条件でギブスエネルギー G を計算したのが図 1 である。図には圧力を $p = 10\text{ MPa}$, 温度を 473 K に変えた条件についても併せて示した。また、この曲線の極小値となる反応進行度も示した。これらは以下の実用の方法により求めた値(例題 6)と一致していることが確認される。

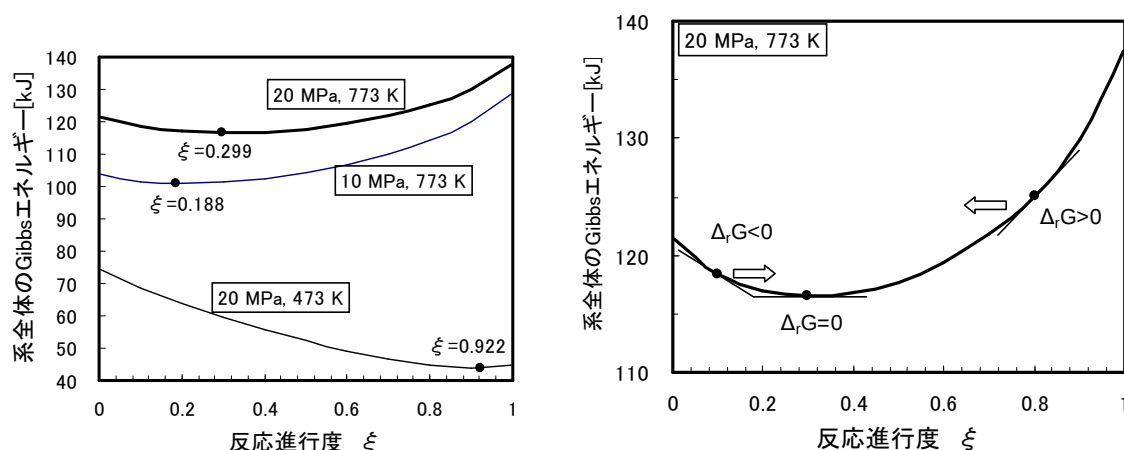


図 1 アンモニア生成反応の反応進行度と Gibbs エネルギー<bce38.xls>

図 2 反応進行度と反応平衡

図 1 のように、一般に反応系のギブスエネルギーは混合の効果により ξ に対して下に凸の曲線となる。一般に系の自発的変化の方向はギブスエネルギー G が小さくなる方向である。従って反応系ではこの曲線の最小値の点が反応平衡を表す。ここで反応ギブスエネルギー $\Delta_r G$ をギブスエネルギーの反応進行度に対する勾配で定義する^{1, p.207)}。

$$\Delta_r G = \left(\frac{\partial G}{\partial \xi} \right)_{p,T} \quad (3)$$

すると

$$\Delta_r G(\xi) = 0 \quad (4)$$

となる反応進行度のときがその反応のある温度, 圧力での平衡である。

実用上この平衡点を求めるには、例題1のように全ての G vs. ξ 曲線からその最小点を求めるという方法でなく、以下のようにこの $\Delta_r G(\xi) = 0$ の条件のみを用いて、反応平衡点における反応進行度(転化率)や分圧・組成を直接求める。

反応の化学量論係数 ν_i (反応物は(-)とする)と物質量, 反応進行度との関係は $dn_i = \nu_i d\xi$ なので,

$$\Delta_r G = \left(\frac{\partial G}{\partial \xi} \right)_{p,T} = \sum \nu_i \mu_i \quad (5)$$

である。式(2)を再び用いると平衡の条件 $\Delta_r G = 0$ は次式である。

$$0 = \Delta_r G = \sum v_i (\mu_i^\circ + RT \ln(p_i / p_0)) = \sum v_i \mu_i^\circ + RT \sum v_i (\ln(p_i / p_0)) = \sum v_i \mu_i^\circ + RT \ln(\prod (p_i / p_0)^{v_i}) \quad (6)$$

この式中の標準化学ポテンシャル項は例題 1 で述べたように、再度標準生成ギブスエネルギーの総和 $\Delta_f G_i^\circ$ で置き換えられ、それが反応の標準反応ギブスエネルギー $\Delta_r G^\circ$ である。

$$\sum v_i \mu_i^\circ = \sum v_i \Delta_f G_i^\circ = \Delta_r G^\circ \quad (7)$$

また、平衡定数 K を

$$K \equiv \prod (p_i / p_0)^{v_i} \quad (8)$$

で定義すると、式(6)より平衡定数 K は

$$\Delta_r G^\circ = -RT \ln K \quad (9)$$

となる^{1, p. 209}。 $\Delta_r G^\circ$ は温度だけの関数なので、平衡定数 K も温度だけの関数である。

反応成分の標準状態の標準生成ギブスエネルギー $\Delta_f G^\circ(298\text{ K})$ はデータで与えられているので、標準状態($T=298\text{ K}$)での平衡定数 $K(298\text{ K})$ は次式:

$$RT \ln K(298\text{ K}) = \sum v_i \Delta_f G_i^\circ(298\text{ K}) \quad (10)$$

により簡単に求められる。

【例題2】標準状態の平衡定数

反応: $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$

の 25°C での平衡定数を求めよ。

(解)

$$\Delta_r G^\circ = (\Delta_f G_{\text{CO}_2}^\circ + \Delta_f G_{\text{H}_2}^\circ) - (\Delta_f G_{\text{CO}}^\circ + \Delta_f G_{\text{H}_2\text{O}}^\circ) = (-394.3 + 0) - (-137.2 - 228.6) = -28.5 \text{ kJ/mol}$$

より, $K(298\text{ K}) = 98,420$

【例題3】標準状態の平衡定数

反応: $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$

の 25°C での平衡定数を求めよ。

$$(\text{解}) \Delta_r G^\circ = (2 \times \Delta_f G_{\text{NH}_3}^\circ) - (\Delta_f G_{\text{N}_2}^\circ + 3 \times \Delta_f G_{\text{H}_2}^\circ) = (2 \times (-16.45)) - (0 + 3 \times 0) = -32.7 \text{ kJ/mol}$$

より, $K(298\text{ K}) = 5.4 \times 10^5$

2 反応温度での平衡定数

実際の反応は標準状態とは異なる温度で生じるので、ある温度 T での平衡定数を求めなくてはならない。標準生成ギブスエネルギーはその温度での標準反応エンタルピー $\Delta_r H^\circ(T)$ と反応エントロピー $\Delta_r S^\circ(T)$ から求められる。^{1, p. 209}

$$\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ \quad (10)$$

よってある温度 T での平衡定数は

$$\ln K(T) = -\Delta_r H^\circ(T) / RT + \Delta_r S^\circ(T) / R \quad (11)$$

である。

$\Delta_r H^\circ, \Delta_r S^\circ$ が温度変化しないと仮定した場合は、平衡定数の温度変化は近似的に次式である。

$$\ln K = -\Delta_r H^\circ(298\text{ K}) / RT + (\text{定数}) \quad (12)$$

すなわち,

$$\ln\left(\frac{K_2}{K_1}\right) = -\frac{\Delta_r H^\circ(298\text{ K})}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right) \quad (13)$$

である^{1, p. 220}。

【例題 4】アンモニア合成反応の平衡定数<bce29.xls>

アンモニア合成反応: $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$ の 773 K における平衡定数 K_2 を求めよ。

(解) $K_1(298\text{ K}) = 5.4 \times 10^5$, $\Delta_r H^\circ(298\text{ K}) = -92.2\text{ kJ/mol}$ より, $K_2(773\text{ K}) = 6.3 \times 10^{-5}$ 。(この方法による計算を例題 5 の図中に示す。)

実用的には以下のように式(10) ($\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T\Delta_r S^\circ$) におけるエンタルピー, エントロピーの温度変化考慮して計算する。(反応各成分 i の熱容量をが3次式: $C_{pi} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3$ で表されているとする。)

$$\Delta_r H^\circ(T) = \Delta_r H^\circ(298\text{ K}) + \int_{298}^T \Delta C_p dT = \Delta_r H^\circ(298\text{ K}) + [aT + (b/2)T^2 + (c/3)T^3 + (d/4)T^4]_{298}^T \quad (14)$$

$$\Delta_r S^\circ(T) = \Delta_r S^\circ(298\text{ K}) + \int_{298}^T \frac{\Delta C_p}{T} dT = \Delta_r S^\circ(298\text{ K}) + [a \ln T + bT + (c/2)T^2 + (d/3)T^3]_{298}^T \quad (15)$$

ここで, a, b, c, d は反応各成分の C_{pi} 多項式の係数 a_i, b_i, c_i, d_i の総和であり,

$$\Delta C_p = a + bT + cT^2 + dT^3 = (\sum v_i a_i) + (\sum v_i b_i)T + (\sum v_i c_i)T^2 + (\sum v_i d_i)T^3 \quad (16)$$

である。(v_i は反応の化学量論係数(反応物は(-)とする)) また, 標準温度(298 K)の標準反応エンタルピー, エントロピーは

$$\Delta_r H^\circ(298\text{ K}) = \sum v_i \Delta_f H_i^\circ(298\text{ K}) \quad (17)$$

$$\Delta_r S^\circ(298\text{ K}) = \sum v_i S_i^\circ(298\text{ K}) \quad (18)$$

である。以上により, 物性値表から反応各成分 i の標準生成エンタルピー $\Delta_f H^\circ(298\text{ K})$, 標準モルエントロピー $S^\circ(298\text{ K})$ および熱容量式 ($C_{pi} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3$) の 3 つを得て, これに反応の化学量論係数 v_i を考慮することで, 温度 T での標準反応ギブスエネルギー $\Delta_r G^\circ(T)$ が, 従って平衡係定数 K が求められる。これが平衡定数を求める普通の実用的方法である。

【例題 5】アンモニア合成反応の平衡定数<bce29.xls>

アンモニア合成反応: $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$ の 773 K (500°C) における平衡定数を求めよ。

(解) 図のシートの 2-10 行が各成分の化学量論係数 v_i と物性値である。計算温度 T が C4 である。C5, C6 に式(17), (18)を計算する。また, 熱容量式の総和係数 a, b, c, d が C7:C10 である。C11:C14 に式(14), (15)を計算して, C15 に $\Delta_r G^\circ(T)$ が求まる。これより平衡定数が $K = 1.59 \times 10^{-5}$ と求められた。

	A	B	C	D	E	F
1	【平衡定数】		$\sum \nu_i X_i$	N ₂	H ₂	NH ₃
2	量論係数 ν_i			-1	-3	2
3	T0 標準状態	K	298	$=F2*F5+E2*E5+D2*D5$		
4	T	K	773	$=F2*F6+E2*E6+D2*D6$		
5	$\Delta_r H^\circ(T_0), \Delta_f H^\circ$	kJ/mol	-92.22	0	0	-46.11
6	$\Delta_r S^\circ(T_0), S^\circ$	J/K-mol	-198.762	191.61	130.684	192.45
7	$\Delta C_p, C_p=a+bT+cT^2+dT^3$	a	-61.09	28.9	29.11	27.57
8	T in K	b	0.05853	-1.57E-03	-1.92E-03	2.56E-02
9	$=C5+C11/1000$	c	-2.6E-07	8.08E-06	4.00E-06	9.91E-06
10	$=C6+C12$	d	-7.9E-09	-2.87E-09	-8.70E-10	-6.69E-09
11	$=C13-C4*C14/1000$	$\int \Delta C_p dT$	-14857.2	$=D7*D8+E7*E8+F7*F8$		
12	$\Delta_r H(T)=\Delta_r H(T_0)+\int \Delta C_p dT$	kJ/mol	-31.6411	$=C7*(C4-C3)+(C8/2)*(C4^2-C3^2)+(C9/3)*(C4^3-C3^3)+(C10/4)*(C4^4-C3^4)$		
13	$\Delta_r S(T)=\Delta_r S(T_0)+\int (\Delta C_p/T) dT$	J/K-mol	-197.077			
14	$\Delta_r G(T)=\Delta_r H(T)-T \Delta_r S(T)$	kJ/mol	-290.403			
15	$\Delta_r G(T)=\Delta_r H(T)-T \Delta_r S(T)$	kJ/mol	71.02438			
16	R	J/K-mol	8.3145	$=C7*LN(C4/C3)+C8*(C4-C3)+(C9/2)*(C4^2-C3^2)+(C10/3)*(C4^3-C3^3)$		
17	$\ln K(T)=-\Delta_r G(T)/R$		-11.0508			
18	$K(T)$		$=EXP(C17)$			
19			1.59E-05			

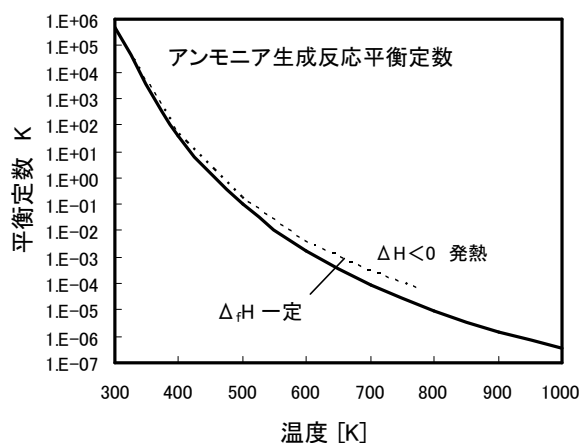


図3 アンモニア生成反応平衡定数の計算

上右図に温度を変えて求めた平衡定数を示す。アンモニア生成反応は発熱反応なので、低温ほど平衡定数が大きく(平衡が生成物寄り)となり、ルシャトリエの法則に従うことが示されている。また、図4はメタン-水蒸気改質反応($\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$)について計算したもの(<bce29.xls>)で、この反応は吸熱反応なので、高温ほど平衡定数が大きいことが示されている。

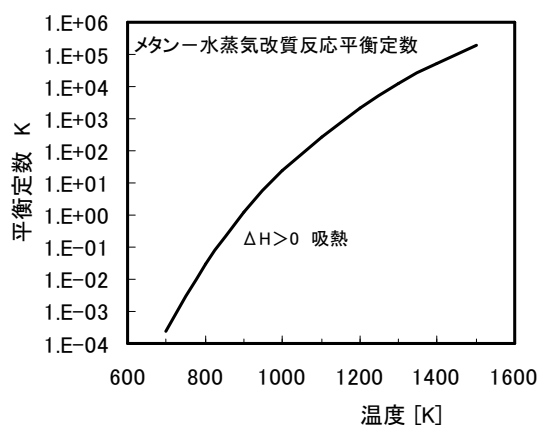


図4 メタン-水蒸気改質反応平衡定数

3 反応の平衡転化率, 平衡組成

平衡定数がわかると、平衡定数の定義: $K = \prod (p_i / p_0)^{\nu_i}$ (19)

からある圧力 p における平衡組成が求められる。これは以下の例題に示すように、転化率 x に関する非線形方程式解法の問題となる。

【例題6】アンモニア生成反応の平衡転化率<bce29.xls>(_temp.xlsで実習)

アンモニア合成反応: $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$ の 773 K における平衡定数は $K = 1.59 \times 10^{-5}$ である。原料の物質量が $\text{N}_2 : a = 1 \text{ mol}$, $\text{H}_2 : b = 3 \text{ mol}$ として、圧力 $p = 10.0 \text{ MPa}$ における平衡転化率と平衡組成を求めよ。

(解) N_2 の転化率を x として、これが未知数(C22)である。平衡時の各成分の物質量は $\text{N}_2 : a(1-x)$, $\text{H}_2 : b(1-x)$, $\text{NH}_3 : 2x$, 全物質: $2x + (a+b)(1-x)$ である(23行)。これらより各成分のモル分率 y_i を求め

(24 行), 分圧を $p_i = py_i$ で計算する(26 行)。標準圧力を $p_0 = 0.10 \text{ MPa}$ として, 平衡定数の定義より,

$$K = \prod \left(\frac{p_i}{p_0} \right)^{v_i} = \frac{(p_{\text{NH}_3} / p_0)^2}{(p_{\text{N}_2} / p_0)(p_{\text{H}_2} / p_0)^3}$$

である。この式は x に関する非線形方程式である。実際には $0 = \left[\frac{(p_{\text{NH}_3} / p_0)^2}{(p_{\text{N}_2} / p_0)(p_{\text{H}_2} / p_0)^3} \right] / K - 1$ として解いた。

(ゴールシークでセル C28 を 0 とする転化率 x (セル C21)を求める。)これより平衡転化率 0.188, 平衡組成は 24 行である。

20	【平衡転化率】				
21	原料	mol	=D21*(1-\$C\$22)	=E21*(1-\$C\$22)	=F2*\$C\$22
22	転化率 x		0.188247		
23	平衡時モル数	mol	3.623507	0.8117533	2.43526
24	モル分率 y_i		0.2240242	0.672073	0.103903
25	全圧 P	MPa	1.0		=D23/\$C\$23
26	分圧 p_i	MPa		2.2402423	6.720727
27	標準圧力 P_0	MPa	0.1		
28	方程式 $K = \prod (p_i/P_0)^{v_i}$		-1.5E-05	=SUM(D23:F23)	
29					
30					
31					
32					

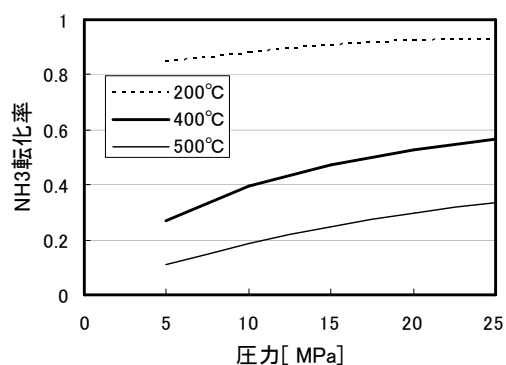


図5 アンモニア生成反応の平衡転化率

図 5 右にアンモニア生成反応の温度と圧力を変えて計算した転化率を示す。この反応は物質量が減る反応なので, ルシャトリエの法則どおり, 圧力が大きいと平衡は生成物寄りとなり, 転化率が大きくなる。図 6 はメタン-水蒸気改質反応: $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$ について同様に計算した平衡転化率である。この反応は物質量が増加する反応なので, 圧力が上がると平衡転化率が低下することが示されている。また, 図 7 は同様に計算した水蒸気熱分解反応 $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + (1/2)\text{O}_2$ の平衡転化率である。

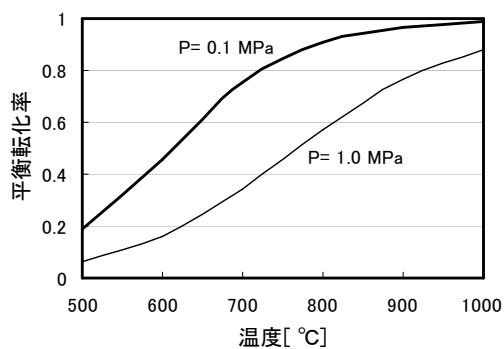


図 6 メタン-水蒸気改質反応の平衡転化率

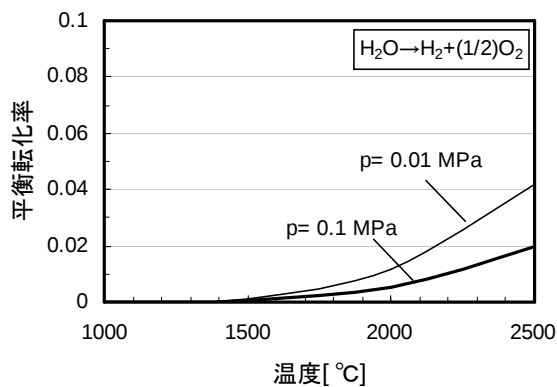


図 7 水蒸気の熱分解反応(水素生成)の平衡転化率

3 反応速度式

反応速度の問題は基本的に常微分方程式解法の問題となっている。ここでは反応速度の理論的基礎は省略して, 代表的な反応速度モデル式を「常微分方程式解法シート」で解く方法を示す。

【例題 7】反応次数の推定<bce30.xls>(<_temp.xls>で実習)

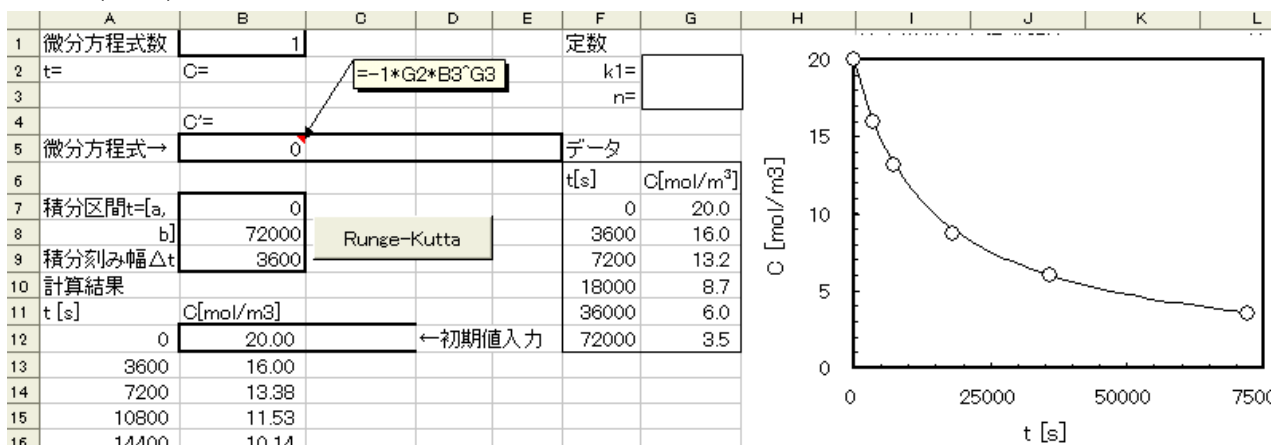
一般に n 次反応の反応速度式は次式である。

$$\frac{dC}{dt} = -kC^n$$

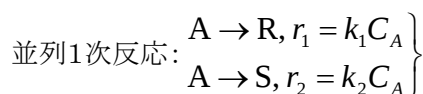
(C :反応物質の濃度, k :反応速度定数, t :時間) C の初期値を C_0 とする。図中のセルF7:C12に示す液相回分反応のデータについて、この式を積分して、データと比較することでパラメータ k , n (反応次数)を推定せよ。なお、この式の解析解は次式である。

$$(C/C_0) = \{1 + (n-1)kC_0^{n-1}t\}^{\frac{1}{1-n}}$$

(解)式(1)をセルB5に記述して、区間、刻み幅の設定をおこない、 k , n を試行してデータにフィッティングする。(ヒント:(dC/dt)の初期の値は約(-4/3600))



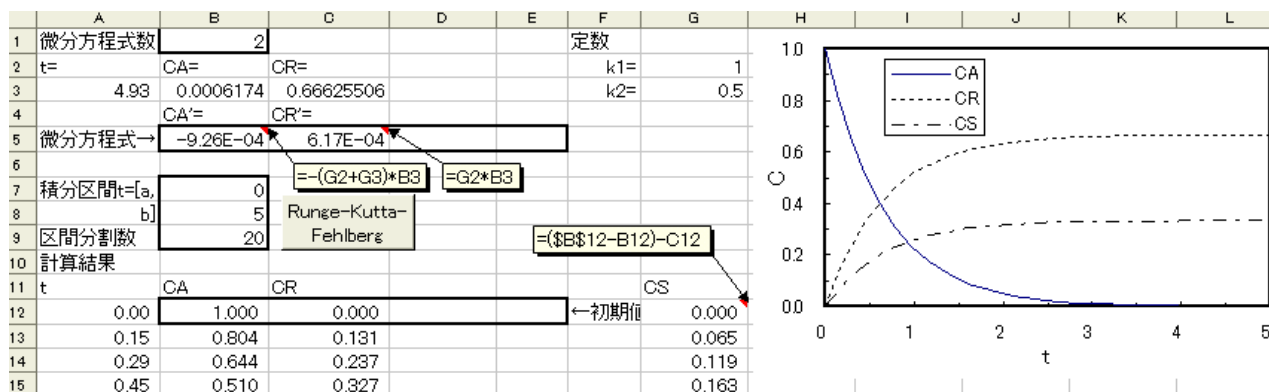
【例題 8】並列1次反応の濃度変化<bce31.xls>(<_temp.xls>で実習)



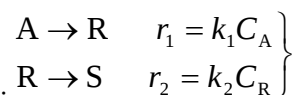
を回分反応器でおこなうとき濃度の経時変化を求めよ。基礎式は鍵成分としてAとRを選ぶと次式である。

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -(k_1 + k_2)C_A \\ \frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A \end{cases}$$

(解)図のパラメータ値 G2,G3 で B5,C5 に上の連立常微分方程式を書き、積分する。G 列にCSの値($C_S = (C_{A0} - C_A) - C_R$)を計算しておく。



【例題 9】逐次反応<bce12.xls>(<bce12_temp.xls>で実習)



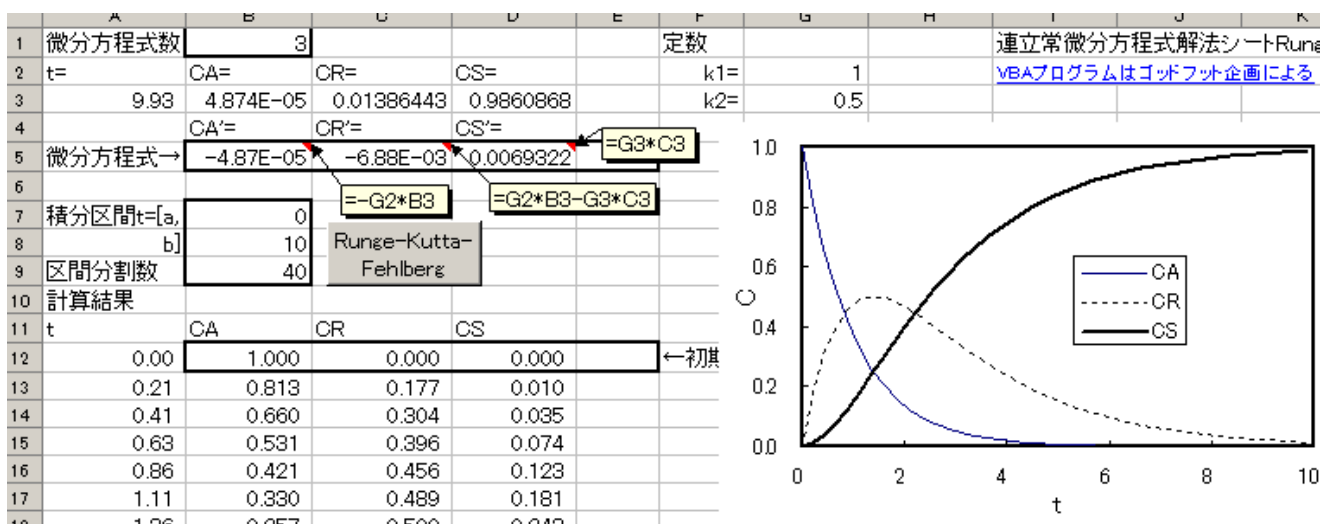
反応物 A が R を経て S になる簡単な逐次反応:

では、各成分の濃度を表わす連立常微分方程式が次のように書ける。

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \\ \frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_R \\ \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_R \end{cases}$$

ここで C_i は各成分の濃度, r は反応速度, k_1, k_2 は反応速度定数である。 $k_1 = 1.0, k_2 = 0.5$, 初期濃度を $C_A = 1, C_R = 0, C_S = 0$ として濃度の時間変化を示せ。

(解) 図が「微分方程式解法シート」である。定数を G2:G3 に、上式を B5:D5 に記述する。積分区間・刻み幅, 初期値(B12:D12)を設定し, ボタンクリックで積分を実行する。図中のグラフに各成分の濃度変化の様子を示す。



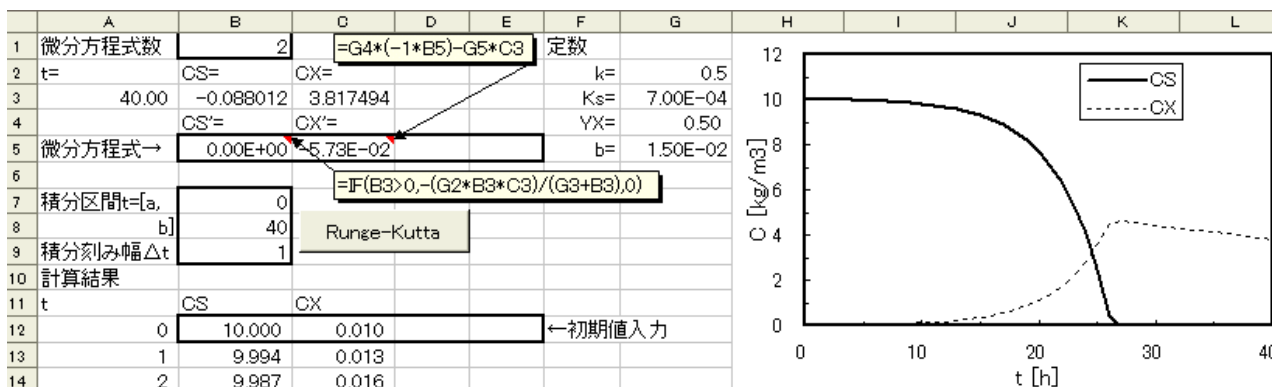
【例題 10】微生物反応<bce33.xls>(<bce33_temp.xls>で実習)

微生物の培養において基質 S (濃度 $C_S[\text{kg/m}^3]$) の消費速度および菌体 X (濃度 $C_X[\text{kg/m}^3]$) の増殖速度が次式で表せる。

$$\begin{cases} \frac{dC_S}{dt} = -\frac{kC_S C_X}{K_S + C_S} \\ \frac{dC_X}{dt} = Y_X \left(-\frac{dC_S}{dt} \right) - bC_X \end{cases}$$

($k = 0.5, K_S = 7 \times 10^{-4}, Y_X = 0.5, b = 0.015$) 初期濃度 $C_{S0} = 10.0, C_{X0} = 0.01 \text{ kg/m}^3$ のとき, 両濃度の経時変化を示せ 3)。

(解) 図の「常微分方程式解法シート」でセル B5, C5 に連立常微分方程式を記述する。ただし, 基質濃度 CS は値が 0 となったら微分値を 0 とする。計算結果より, 基質濃度は培養 27 時間で 0 となり, 以降は自己消化により菌体濃度が減少する。



参考文献

- 1) P. Atkins, J. Paula(千原秀昭・中村亘男訳):アトキンス物理化学第8版(上), 東京化学同人(2009)
- 2) G.M. Barrow (大門寛・堂免一成訳):バーロー物理化学第6版(上), 付録 B, 表 B・3, 東京化学同人(1999)
- 3) (久保田, p. 103)

【Excel 演習レポート課題 13】(作成した Excel シートの 1 ページ目をプリントアウトして提出)

<bce29_temp.xls>を元に【例題 6】アンモニア合成反応の平衡転化率の計算シートを作成する。これを使い, 400℃での圧力と平衡転化率の関係を計算してシート中の表に記入して提出せよ。

【筆記レポート課題 13】(A4 レポート用紙で提出)

問 1 標準状態での平衡定数 K の求め方を述べよ

問 2 ルシャトリエの原理から反応熱の正負および圧力が反応平衡におよぼす影響を定性的に述べよ