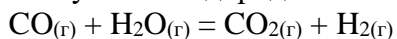


Фамилия _____

**Реакция сдвига для получения водорода
(8 баллов)**

| Вопрос | 1 | 2 | 3 | 4 | Всего |
|-------------|---|---|----|---|-------|
| Техн. баллы | 4 | 4 | 10 | 2 | 20 |
| Оценка | | | | | |

Важной стадией промышленного получения водорода является реакция сдвига:



Ее проводят при давлении, близком к атмосферному, и различных температурах, для ускорения используют разнообразные твердые катализаторы.

1. Используя приведенные ниже данные, рассчитайте равновесный выход водорода из стехиометрической смеси CO и H₂O при температуре 500 °С. Примите, что энтальпии и энтропии веществ не зависят от температуры. **(4 балла)**

| | CO _(г) | H ₂ O _(г) | CO _{2(г)} | H _{2(г)} |
|-------------------------------|-------------------|---------------------------------|--------------------|-------------------|
| $\Delta_f H^\circ$, кДж/моль | –110.5 | –241.8 | –393.5 | |
| S° , Дж/(моль·К) | 197.7 | 188.8 | 213.7 | 130.7 |

Расчет

$\eta(\text{H}_2) = \underline{\hspace{2cm}}$

2. Для этой реакции известно множество катализаторов. Катализатор на основе магнетита приготовили следующим образом: смешали Fe₂O₃ (93 масс.%) и Cr₂O₃, оксид железа перевели в активную форму Fe₃O₄, выдержав в потоке угарного газа (Cr₂O₃ при этом не изменился). Получили частицы с удельной поверхностью 20 м²/г и плотностью 5.0 г/см³.

а) Рассчитайте содержание железа и хрома в полученном катализаторе (в масс.%). **(2 балла)**

б) Считая частицы сферическими, оцените их средний диаметр (в нм). **(2 балла)**

а) Расчет

$\omega(\text{Fe}) = \underline{\hspace{2cm}}\%$

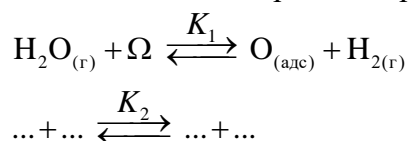
$\omega(\text{Cr}) = \underline{\hspace{2cm}}\%$

Фамилия _____

б) Расчет

$d = \text{_____ нм}$

3. Механизм реакции сдвига на данном катализаторе (механизм Темкина) имеет вид (Ω – свободный активный центр на поверхности, K_i – константы равновесия):



а) Запишите уравнение второй стадии. **(1 балл)**

б) Запишите выражения для констант равновесия K_1 и K_2 . (Степень заполнения поверхности атомами кислорода обозначьте θ_1) **(2 балла)**

в) Определите долю свободных активных центров θ_0 при равновесии, полученном из стехиометрической смеси реагентов (в окончательное выражение должны входить только константы равновесия). **(4 балла)**

г) Запишите выражение для скорости образования водорода в самом начале реакции. **(1 балл)**

д) В одном из экспериментов начальные давления реагентов составили по 0.50 атм. Рассчитайте скорость образования водорода в момент, когда $p(\text{CO}) = 0.30$ атм, если в этот момент 80% поверхности свободно. Константа скорости прямой реакции $k_1 = 0.080 \text{ мин}^{-1}$, а константа равновесия $K_1 = 4.0$. **(2 балла)**

а) Уравнение:

б) $K_1 =$ $K_2 =$

в) Выкладки:

$\theta_0 =$

г) $\frac{dP_{\text{H}_2}}{dt} =$

Фамилия _____

д) Расчет:

$$\frac{dP_{\text{H}_2}}{dt} = \text{_____ атм/мин}$$

4. На другом катализаторе реализуется механизм Ленгмюра-Гиншельвуда, в котором все газообразные вещества находятся в адсорбционном равновесии с поверхностью катализатора, а сама реакция сдвига происходит необратимо на поверхности и является лимитирующей стадией.

Запишите выражение для скорости реакции на поверхности. При каких условиях эта реакция будет иметь первый порядок по H_2O и минус первый по CO ? **(2 балла)**

Выкладки:

$$r =$$

Условие, при котором реакция имеет первый порядок по H_2O и минус первый по CO :