



Τεχνολογικό
Πανεπιστήμιο
Κύπρου

Σχολή Μηχανικής και
Τεχνολογίας

Μεταπτυχιακή Εργασία

Ελεγχόμενη μεταβολή της ελεύθερης ενέργειας Gibbs κατά τη διάρκεια αυθόρμητης χημικής αντίδρασης αερίων

Κωνσταντίνος Κούρης

Λεμεσός, Ιούλιος 2018

ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ
ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΥΛΙΚΩΝ

**Ελεγχόμενη μεταβολή της ελεύθερης ενέργειας Gibbs κατά τη
διάρκεια αυθόρμητης χημικής αντίδρασης αερίων**

του

Κωνσταντίνου Κούρη

Επιβλέπων Καθηγητής
Δρ. Νίκος Αγκαστινιώτης

Λεμεσός, Ιούλιος 2018

Πνευματικά δικαιώματα

Copyright © Κωνσταντίνος Κούρης, 2018

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Η έγκριση της πτυχιακής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών και Επιστήμης και Μηχανικής Υλικών του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου δεν υποδηλώνει απαραίτητως και αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα εκ μέρους του Τμήματος.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερα τον επιβλέποντα καθηγητή μου Δρ. Νίκο Αγκαστινιώτη, ο οποίος μέσα από τις οδηγίες του συντέλεσε καθοριστικό ρόλο στην εκπόνηση της πτυχιακής μου εργασίας. Η συμβολή του ήταν πραγματικά πολύτιμη.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ	i
ABSTRACT	ii
ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΓΡΑΦΗΜΑΤΩΝ	iii
ΣΥΝΤΟΜΟΓΡΑΦΙΕΣ	iv
ΑΠΟΔΟΣΗ ΟΡΩΝ	v
ΕΙΣΑΓΩΓΗ	1
1. ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 – ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΙΣ ΜΕΤΑΞΥ ΑΕΡΙΩΝ	3
1.1 Εισαγωγή	3
1.2 Κριτήριο Ισορροπίας Gibbs και Προσομοίωση Ισοβαρούς Ισόθερμης Αυθόρμητης Χημικής Αντίδρασης	5
1.3 Καθορισμός της Σταθεράς Ισορροπίας	18
1.4 Επίδραση της Θερμοκρασίας επί της Σταθεράς Ισορροπίας	22
2. ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 – ΚΡΙΤΗΡΙΟ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ ΚΑΙ ΣΥΣΧΕΤΙΣΜΟΙ ΧΗΜΙΚΟΥ ΕΡΓΟΥ ΚΑΙ ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΕΝΤΡΟΠΙΑΣ ΚΑΤΑ ΤΗ ΔΙΑΡΚΕΙΑ ΜΙΑΣ ΑΥΘΟΡΜΗΤΗΣ ΧΗΜΙΚΗΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ ΑΕΡΙΩΝ.....	44
2.1 Εισαγωγή	44
2.2 Τα επιμέρους Στάδια μιας Αυθόρμητης Χημικής Αντίδρασης	46
2.3 Παραγωγή και Ποσοτικοποίηση Εντροπίας	50
2.4 Παραγωγή και Ποσοτικοποίηση Χημικού Έργου	54
3. ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 – ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΚΑΙ ΕΛΕΓΧΟΜΕΝΗ ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΧΗΜΙΚΟΥ ΕΡΓΟΥ ΚΑΙ ΕΝΤΡΟΠΙΑΣ ΓΙΑ ΜΙΑ ΙΣΟΒΑΡΗ ΚΑΙ ΙΣΟΧΩΡΗ ΙΣΟΘΕΡΜΗ ΑΥΘΟΡΜΗΤΗ ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ.....	61
3.1 Εισαγωγή	61

3.2 Προσομοίωση της Αυθόρμητης Αποσύνθεσης της Αμμωνίας σε Σταθερή Πίεση	63
3.3 Μηχανισμοί Παραγωγής Χημικού Έργου και Συσχετισμός με την Παραγωγή Εντροπίας σε Σταθερή Πίεση	72
3.3.2 Ενδόθερμη Διαδικασία	72
3.3.2 Εξώθερμη Διαδικασία	78
3.4 Παραγωγή και Συσχετισμός Χημικού Έργου και Εντροπίας κατά την Αυθόρμητη Αποσύνθεση της Αμμωνίας σε Σταθερή Πίεση	82
3.5 Προσομοίωση και Παραγωγή Χημικού Έργου και Εντροπίας κατά την Αυθόρμητη Αποσύνθεση της Αμμωνίας σε Σταθερό Όγκο	97
4. ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 – ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	104
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ / ΑΝΑΦΟΡΕΣ.....	106

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η σύνθεση ή κατασκευή μιας κατάστασης ισορροπίας καθορισμένης σύστασης και μεγέθους μέσα από μια θερμική διαδικασία σταθερής πίεσης και θερμοκρασίας αποτέλεσε τον στόχο της παρούσας εργασίας.

Η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε βασίστηκε σε μια τυχαία σύσταση η οποία καθορίστηκε μέσα από την αλληλεπίδραση των συστατικών που τη συναποτελούσαν. Η αλληλεπίδραση των συστατικών παρακολούθηθηκε δυναμικά ενώ τα συστατικά βρίσκονταν στην αέρια κατάσταση μέχρι να επιτευχθεί η σύσταση ισορροπίας.

Η προσέγγιση έχει τη δυνατότητα να περιγράψει την όποια αλληλεπίδραση μεταξύ των όποιων συστατικών σε προκαθορισμένη θερμοκρασία πράγμα το οποίο μας επιτρέπει να εντοπίσουμε τη χαμηλότερη ή τη μέγιστη θερμοκρασία που μπορεί να ενεργοποιηθεί η αλληλεπίδραση χωρίς να διακινδυνεύεται η αποσταθεροποίηση του υλικού που προκύπτει. Η πίεση θεωρήθηκε σταθερή αλλά έχει τη δυνατότητα να προεπιλεχθεί και να τύχει μεταβλητότητας αν αυτό κριθεί απαραίτητο.

Ενώ η μεθοδολογία που έχει ακολουθηθεί είναι generic και βασίζεται σε θεμελιώδη θερμοδυναμικά κριτήρια ισορροπίας ταυτόχρονα διακρίνεται από μοναδικότητα λόγω της φυσικής ερμηνείας που προσδίδεται στους συσχετισμούς που προκύπτουν μεταξύ των εμπλεκόμενων ποσοτήτων.

Αναπόσπαστο μέρος της διαδικασίας ήταν και η αποτελεσματικότητα όσον αφορά στην απομόνωση της προεπιλεγείσας κατάστασης του τελικού προϊόντος πράγμα το οποίο επιτυγχάνεται εξορισμού λόγω της φύσης της διαδικασίας καθότι η έκταση του αυθορμητισμού όχι μόνο ρυθμίζει τη διάρκεια της διαδικασίας αλλά ταυτόχρονα προκαθορίζει ελεγχόμενα τη σύσταση του τελικού προϊόντος.

Λέξεις κλειδιά: *Ιδανικό αέριο, Αυθόρμητη Διαδικασία, Χημική Αντίδραση, Μείγμα, Σταθερά Ισορροπίας, Εντροπία, Ελεύθερη Ενέργεια Gibbs, Αμμωνία, Χημικό Έργο.*

ABSTRACT

The goal of this work was the synthesis or construction of an equilibrium state of fixed composition and size through a thermal process of constant pressure and temperature.

The methodology followed was based on a random composition which was determined through the interaction of its constituents. This interaction was dynamically followed while the components were in the gaseous state until the equilibrium composition was achieved.

The approach can describe any interaction between any components at a predetermined temperature. This allows us to identify the minimum or maximum temperature at which the interaction can be activated without compromising the destabilization of the resulting material. The pressure was considered fixed, but it can be preselected and can vary if necessary.

While the methodology followed is generic and is based on fundamental Thermodynamic Equilibrium criteria, it is at the same time, unique due to the physical interpretation given to the correlations that arise among the quantities involved.

An integral part of the process was also the efficiency of isolating the preselected state of the final product which is achieved by the nature of the process since the extent of spontaneity not only regulates the duration of the process but at the same time predetermines the composition of the final product.

Keywords: *Ideal Gas, Spontaneous Process, Chemical Reaction, Mixture, Equilibrium Constant, Entropy, Gibbs Free Energy, Ammonia, Chemical Work.*