

INDHOLDSFORTEGNELSE

	Side
2. ALMEN KEMI	2
2.1 Introduktion	2
2.2 Kemiske grundbegreber	2
2.2.1 Grundstofferne	2
2.2.2 Kemiske forbindelser	4
2.2.3 Stofomdannelse	6
2.2.4 Blandinger og koncentrationsangivelser	8
2.2.5 Specielle koncentrationsangivelser	10
2.2.6 Ligevægtsbegrebet	11
2.2.7 Reaktionshastigheder/kinetik	15
2.3 Resumé	19

2. ALMEN KEMI

2.1 Introduktion

Kemikere har helt tilbage fra alkymisternes tid opbygget en begrebsverden og et sprogbrug, der i mange tilfælde af udenforstående opfattes som sort snak og af og til giver anledning til misforståelser og er en medvirkende årsag til den såkaldte kemiskræk.

Da stort set alle opfatter sloganet om at "*der er kemi i alt*" som sandt, er det så meget desto vigtigere at undgå kemiskrækken og i stedet opbygge en dialog imellem kemikerne (de der kan sproget) og "de andre" så man i fællesskab kan få belyst og bearbejdet kemiske problemstillinger til fælles bedste.

Dette kræver, at man taler tilnærmelsesvis samme sprog og da kemikernes begrebsverden og sprogbrug faktisk er ret god til at beskrive kemiske observationer, der ofte er indirekte og f.eks. sjældent kan registreres direkte med vore sanser, er det oplagt at indlede "Kursus i Kraftværkskemi" med at introducere de vigtigste kemiske grundbegreber og termer for at lette præsentationen af de efterfølgende kraftværkskemiske emneområder.

2.2 Kemiske grundbegreber

Overskriften for dette kapitel er almen og fysisk kemi, men det har altid været svært at trække en skarp grænse imellem fysik og kemi, hvad begreber som fysisk kemi og kemisk fysik tydeligt illustrerer.

Forklaringen herpå er at fysikken både beskæftiger sig med at beskrive atomare fænomener og makroskopiske observationer som f.eks. missilbaner og aerodynamik, mens kemien behandler området imellem disse to yderpunkter, der i stor udstrækning består i en karakterisering af stof og stoffers opførsel.

I den moderne kemi drejer det sig i al væsentlighed om at beskrive og forstå hvorledes de omkring 90 naturligt forekommende grundstoffer opfører sig.

Den allervigtigste kemiske grundregel er at stof ikke kan forsvinde eller at massen er konstant.

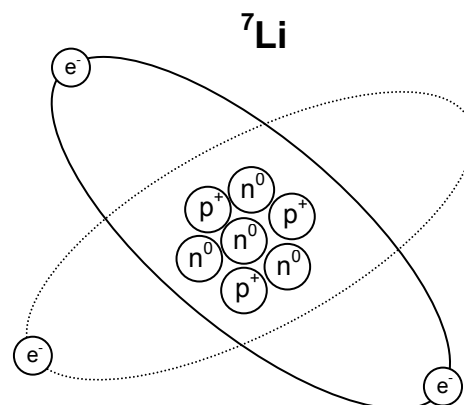
Stof kan derimod godt omdannes og optræde i en anden form, men det forsvinder ikke og vi må derfor starte med at forstå hvad stof er.

2.2.1 Grundstofferne

Stof opbygges af atomer eller grundstoffer hvoraf, der som allerede nævnt findes omkring 90 naturligt forekommende.

Ifølge Bohrs elektronmodel er atomer opbygget af en positivt ladet kerne, hvorom der svæver negativt ladede elektroner (e^-). Atomets masse findes næsten udelukkende i kernen, der består af et antal positivt ladede protoner (p^+) og neutrale neutroner (n^0).

Antallet af protoner i atomets kerne bestemmer hvilket atom, der er tale om og man har for lethedens skyld valgt et symbol herfor. Klor har f.eks. 17 protoner i kernen og symbolet er **Cl**.



Klor, der har 17 protoner i kernen kan have enten 18 eller 19 neutroner i kernen. De to forskellige slags klor kaldes klorisotoper og da protoner og neutroner hver vejer en såkaldt atomvejtaler vejer de to forskellige klorisotoper altså henholdsvis 35 og 36 atomvejtaler og man skriver henholdsvis ${}^{35}\text{Cl}$ og ${}^{36}\text{Cl}$. Figuren illustrerer forholdene for ${}^7\text{Li}$.

Imidlertid interesserer kemikere sig kun sjældent for isotoperne, der kun meget vanskeligt lader sig isolere og i stedet arbejdes med de naturligt forekommende isotopblandinger. For klor er det nogenlunde lige meget af isotoperne ${}^{35}\text{Cl}$ og ${}^{36}\text{Cl}$, hvilket indebærer at kemikere tillægger et kloratom en masse på 35,5 atomvejtaler. Tilsvarende er atomvægten for svovl (**S**) 32 atomvejtaler.

Størrelsen af et atom måles i nm (10^{-9} m) og det er således umuligt at se og tælle atomer. Når vi, som det ofte er tilfældet, har brug for at kende antallet af en bestemt slags atomer benytter vi derfor kendskabet til de enkelte grundstoffers atomvægt. I praksis er enkeltatomer og atomvægte målt i atomvejtaler ret uhåndterbare og man arbejder i stedet for med mol der er det antal atomer ($6,023 \cdot 10^{23}$), der er i lige så mange gram af et grundstof, som dets atomvægt i atomvejtaler angiver. Der er altså det samme antal atomer ($6,023 \cdot 10^{23}$) i 32 g svovl og 35,5 g klor.

Det er alene atomkernen, som bestemmer hvilket grundstof, der er tale om, men det er udelukkende elektronerne, der er bestemmende for dets kemiske opførsel.

En atomkerne vil med sin positive ladning have stor tendens til at indfange elektroner med negativ ladning indtil det er neutralt. Ifølge Bohrs elektronmodel vil elektronerne bevæge sig omkring atomkernen i forskellige baner eller skaller. I disse skaller er der plads til et bestemt antal elektroner og de fyldes op indefra og ud. Den kemiske opførsel afhænger hovedsageligt af antallet af elektroner i den yderste skal og i det såkaldte periodiske system (se side 18) er grundstofferne opstillet efter antallet af elektroner i den yderste skal. Indenfor samme gruppe (lodrette kolonne) har grundstofferne det samme antal elektroner i den yderste skal og derfor beslægtede kemiske egenskaber.

Gruppe VIIIA, helt til højre, kaldes ædelgasserne. Disse har netop den yderste elektronskal helt udfyldt og er karakteriseret ved at være uhyre stabile og meget uvildige til at reagere med andre stoffer.

Gruppe VIIA kaldes halogenerne. Disse stoffer mangler netop en elektron i at den yderste elektronskal er helt udfyldt og har stor tilbøjelighed til at skaffe sig adgang til en ekstra elektron, f.eks. ved at optage en elektron og danne en negativt ladet ion.

Gruppe IA, helt til højre, kaldes for alkalimetallerne, der alle har en enkelt elektron i den yderste skal, som de et langt stykke hen af vejen godt kunne være foruden og derfor forsøger at afsætte, f.eks. ved at afgive en elektron og danne en positivt ladet ion.

Vi ved i dag at Bohrs elektronmodel er utilstrækkelig, men den kan forklare mange kemiske observationer og er velegnet til at forklare opbygningen af grundstoffernes periodiske system.

Grundstofferne udgør "byggeklodserne" på kemikernes legeplads og i kraftværkskemi optræder de praktisk talt alle.

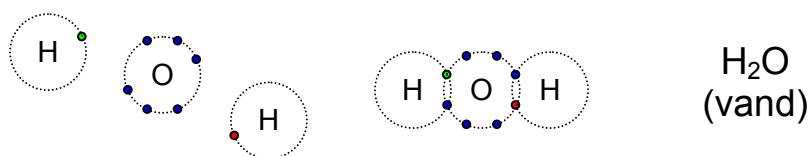
Til energifrembringelse er de vigtigste grundstoffer C, H, O og S mens kullenes askeindhold sørger for at resten af grundstofferne er repræsenteret på forbrændingssiden.

Materialsiden repræsenteres af grundstoffer som Fe, Cr, Ni, Mo, V, Ti, Al, Cu, Zn, Si, P og S mens vand/damp kredsløbet udover hvad materialsiden kan byde på (nedbrydningsprodukter) også kan levere problemstillinger, hvor f.eks. grundstofferne Na, K, Ca, Mg og S indgår.

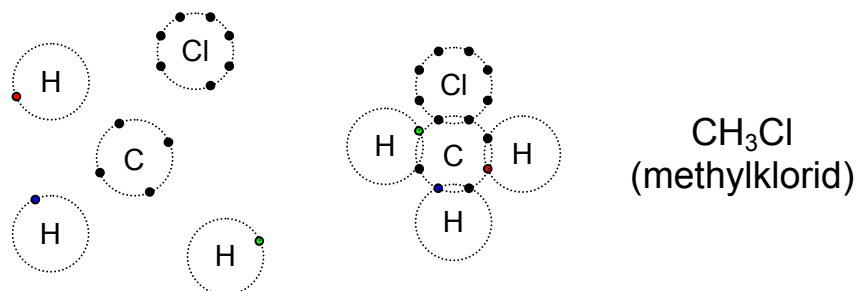
2.2.2 Kemiske forbindelser

De millioner af stoffer (kemiske forbindelser), der udgør den verden, som vi lever i, er opbygget af de omkring 90 naturligt forekommende grundstoffer. For mange af grundstofferne gælder, at de ikke forefindes eller kun meget vanskeligt kan fremstilles som de rene grundstoffer. I stedet indgår de med de nedenfor omtalte bindingsmekanismer i kemiske forbindelser og molekyler.

Klor er ustabil som elementært klor (Cl), men kan f.eks. optræde som et gasformigt klormolekyle (Cl_2), som en klor ion (Cl^-) i en vandig opløsning eller sammen med andre grundstoffer indgå i kemiske forbindelser som methylklorid (CH_3Cl) eller natriumklorid (NaCl).



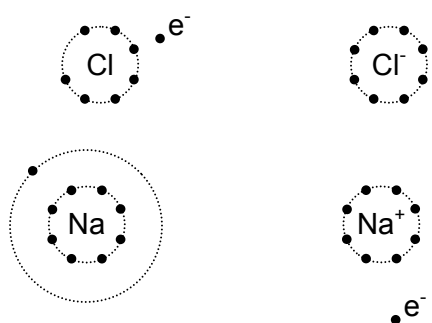
Den drivende kraft i opbygningen af sådanne klorholdige forbindelser er at kloratomet, der som nævnt er et halogen, der mangler en elektron i at den yderste elektronskal er fuld, forsøger at få adgang til ekstra elektron.



Dette sker ved at der dannes kemiske bindinger. De vigtigste typer af kemiske bindinger er kovalente bindinger, ion bindinger, metalbindinger, kompleksbindinger og brintbindinger.

Kovalente bindinger opstår ved at atomerne deles om elektroner således at de opnår, at den yderste elektronskal er fyldt. Figuren illustrerer hvordan dette sker i klormolekylet (Cl_2), vandmolekylet (H_2O) og methylkloridmolekylet (CH_3Cl) idet prikkerne rundt om atomerne er elektronerne i den yderste skal. Den yderste skal på klor (Cl), ilt (O) og kulstof (C) kan indeholde 8 elektroner mens den yderste skal på brintatomet (H) kun kan indeholde 2 elektroner.

Ion bindinger optræder imellem ioner, dvs. ladede atomer/molekyler. Den drivende kraft for dannelsen af ioner er den samme som ved dannelsen af kovalente bindinger, nemlig at opnå at de yderste elektronskaller på de enkelte atomer er fyldte. Som tidligere nævnt vil kloratomet



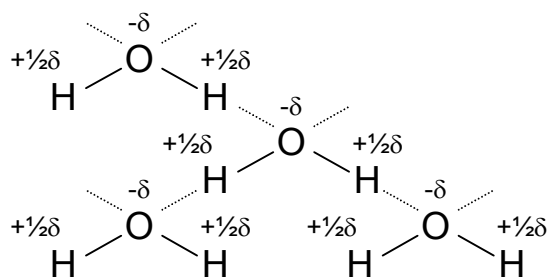
meget gerne i nærheden af en ekstra elektron således at den yderste skal bliver fuld - dette kan opnås ved at indfange en elektron og danne en klorid ion (Cl^-) med en ekstra negativladning som vist på figuren. På figuren er det ligeledes vist hvordan natrium (Na) ved at afgive en elektron og danne den positivt ladede natriumion (Na^+) opnår at den yderste elektronskal netop er fyldt. Sulfat (SO_4^{2-}), nitrat (NO_3^-) og ammonium ionen (NH_4^+) er eksempler på komplekse ioner opbygget af flere atomer, der udover at have optaget eller afgivet en eller flere elektroner er bundet sammen af kovalente bindinger.

Ioner med modsat ladning, som f.eks. Na^+ og Cl^- vil tiltrække hinanden med betydelige kræfter og bindes derved sammen - en sådan binding kaldes en ion binding og resulterer i et uhyre stabilt stof, her natriumklorid (NaCl).

For metallerne, der i vid udstrækning står i den midterste del af det periodiske system, de såkaldte sidegrupper, er billedet omkring de yderste elektronskaller mindre enkelt. Som rene metaller eller legeringer (metalblandinger) bindes de sammen vha. såkaldte metalbindinger, hvor elektronerne populært sagt deles imellem alle atomerne på en slags "time share" basis således, at alle atomerne i det mindste noget af tiden føler at de yderste elektronskaller er fyldte. Dette betyder at en stor mængde elektroner er mobile og let flyttes rundt imellem de forskellige atomer - dette er baggrunden for at metallerne har høj elektrisk ledningsevne og høj varmeledningsevne.

Kompleksbindinger er en type mindre stærke bindinger, hvor et centralt molekyle ofte et centralatom har tilbøjelighed til at omgive sig med nogle såkaldt ligander, hvorved hele komplekset stabiliseres. Det centrale atom er typisk en overgangsmetalion og liganderne er eksempelvis ammoniak (NH_3), halogenioner (F^- og Cl^-), cyanidioner (CN^-) og hydroxidioner (OH^-). Kompleksforbindelser er ofte stærk farvede og et eventuelt blåligt skær ved regenerationsvandet fra kondensatrensaneanlæggene kan skyldes det blå kobber ammoniak kompleks ($\text{Cu}(\text{NH}_3)_4^{2+}$). Efterhånden som næsten alle vore anlæg har kondensatorer med titanrør er det et sjældent syn. Et andet eksempel på kompleksdannelse er ferriflourid komplekset ($\text{Fe}(\text{F})_6^{3-}$), der har stor betydning ved kedeludsyringer med flussyre (HF).

Som den sidste bindingstype nævnes her brintbindingen, der har stor betydning for vands egenskaber og dermed al aktivitet på jorden, som vi kender den. Brint og ilt atomerne i vand er som allerede beskrevet bundet sammen af kovalente bindinger, men iltatomet har en tendens til at optage elektroner mens brintatomerne har en tilsvarende tilbøjelighed til at afgive elektroner. Den samlede effekt er ikke kraftig nok til at danne ioner og dermed en ionbinding, men alligevel sker der en delvis ladningsforskydning således at ilt atomerne får en negativ deladning og brintatomerne tilsvarende en positiv deladning. Tendensen til at negative og positive ladninger finder sammen bevirker at der opstår en ordning af vandmolekylerne således at brint- og ilt atomer fra forskellige vandmolekyler bindes sammen - en såkaldt brintbinding, der også har betydning for andre stoffer end vand.



Som for grundstofferne er der ofte behov for at kende antallet af molekyler eller ioner i en eller anden sammenhæng og hvor det for grundstofferne var deres atomvægt, der var nøglen er det for molekylerne den tilsvarende molekylvægt eller molvægt. Da massen er konstant og ikke ændres fordi, der indgår kemiske bindinger (foretages stofomdannelse) er molekylmassen blot summen af de indgående atommasser.

Atommasserne for C, O, S og H er henholdsvis 12, 16, 32 og 1 at (g/mol) og ved optælling og addition kan molvægtene af kemiske forbindelser som CO_2 , SO_2 , CO_3^{2-} , H_2O , SO_4^{2-} og CH_4 i samme rækkefølge bestemmes til 44, 32, 60, 18, 96 og 16 g/mol.

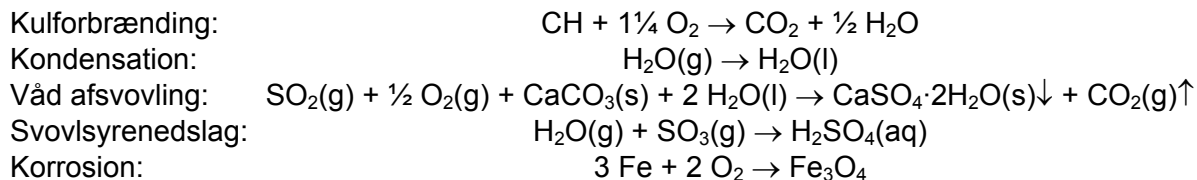
2.2.3 Stofomdannelse

Karakteriseringen af rene stoffer (molekyler), hvor stofegenskaber som grundstofsammensætningen (elementaranalyse), molekylstruktur, smelte- og kogepunkter, varmeledningsevne, elektrisk ledningsevne, varmekapacitet, fordampningsvarme etc. bestemmes, opfattes af mange som fysik eventuelt en blanding af fysik og kemi, men når der bliver tale om at stofferne omdannes f.eks. opløses i vand og reaktion ved syretilsætning er alle enige om at vi kommer ind i kemikernes kerneområde.

Stofomdannelse kan være ønskede eller uønskede, men er uhyre almindelige. Fra kraftværkets verden kender vi som ønskede stofomdannelse f.eks. forbrændingen, hvor kullet reagerer med luft og giver røggas, kondensationen i lavtryksturbine/kondensator eller fjernvarmeveksler, hvor damp bliver til kondensat og den våde afsvovling, hvor svovldioxid i røggassen bliver til gips. Som eksempler på uønskede stofomdannelse kan nævnes svovlsyrenedslag i luften, hvor røggassens indhold af svovltrioxid og vanddamp ved lave temperaturer reagerer og danner svovlsyre (væske) og korrosion og hvor jern reagerer med ilt og udsat for vejrlig danner rust - dannelsen af et beskyttende magnetitlag (rust) på kedlens vand/damp side er derimod en ønskværdig reaktion.

Disse velkendte stofomdannelse forsøger kemikerne at forstå ved at opskrive reaktionsskemaer, der beskriver hvilke molekyler, der indgår og hvorledes de omdannes.

De angivne eksempler kunne således blandt kemikere blive til:

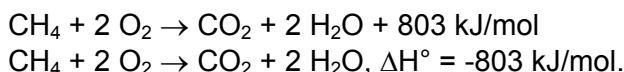


Reaktionsskemaerne beskriver primært støkiometrien, dvs. hvad og hvor meget der reagerer (reaktanter) til hvad og hvor meget (produkterne). Det er vigtigt at huske på at støkiometrien i reaktionsskemaet vedrører antallet (mol) af reagerende og producerede molekyler. Da kemien kun vedrører elektroner og ikke kernerne kan der ikke forsvinde eller opstå grundstoffer ved kemiske reaktioner - der skal derfor være lige mange af de forskellige grundstoffer på hver side af reaktionspilen - men de indgår som oftest i forskellige molekyler før og efter reaktionen.

Derudover finder man ofte andre oplysninger indbygget i reaktionsskemaet for en kemisk reaktion. F.eks. kan man i en parentes efter et stof angive, hvilken fase dette befinder sig i. Almindeligvis anvender man hertil de engelske betegnelser **(g)** for gasfase (gas), **(l)** for væskefase (liquid), **(s)** for faststof (solid) og **(aq)** for vandig opløsning (aqueous). Med pile op eller ned kan man angive om der dannes gas, der bobler op eller stof, der fælder ud ligesom der tit kan være en angivelse af reaktionsvarmen.

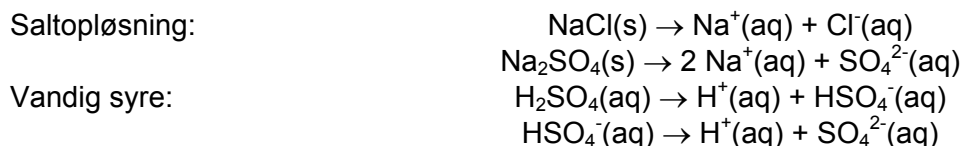
Reaktioner, der udvikler varme f.eks. forbrændingsreaktioner kaldes **exoterme**, mens varme-forbrugende reaktioner, f.eks. kalkbrænding kaldes **endoterme**. I mange tilfælde refererer kemikere til såkaldte reaktionsenthalpier (ΔH°), der er reaktionsvarmer med modsat fortegn.

Afbrændingen af methan (CH_4) skrives f.eks. på følgende ligeværdige måder:

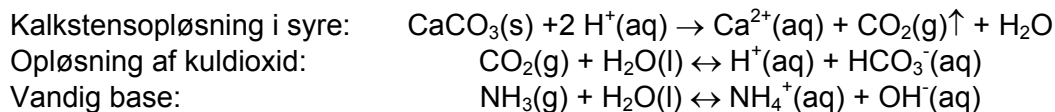


Der findes mange forskellige typer kemiske reaktioner, som det vil føre for vidt at komme ind på i denne sammenhæng, men et par af de væsentligste vises ved eksempler i det følgende.

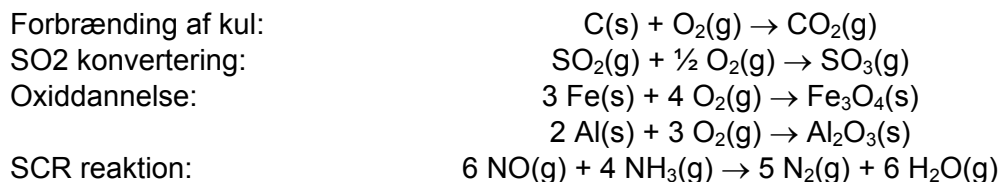
Dissociationsreaktioner er reaktioner, hvor et molekyle simpelthen går i stykker i to eller flere fragmenter. Opløsning af forskellige salte, syrer og baser i vand er eksempler herpå:



Syre-/base reaktioner er reaktioner, hvori der overføres (dannes eller forbruges) protoner (H^+) eller hydroxidioner (OH^-). Der er mange eksempler f.eks. de ovenfornævnte vandige syrer og baser, men også opløsning af karbonater (CO_3^{2-}) i syre og kuldioxids (CO_2) og ammoniak (NH_3) opløsning i vand er eksempler.



Redox reaktioner er reaktioner, hvor der overføres elektroner imellem de optrædende molekyler. Nogle atomer har stor tilbøjelighed til at optage elektroner i modsætning til andre, der har tendens til at afgive elektroner. Når et atom/molekyle afgiver elektroner bliver det oxideret og hvis det modtager elektroner bliver det reduceret. Da elektronerne ikke kan leve frit i længere tid af gangen vil oxidation og reduktion altid ske samtidig og den resulterende reaktion benævnes en redoxreaktion. Ofte er oxidationsmidlet, der selv bliver reduceret, atmosfærisk ilt som f.eks. ved forbrænding, SO_2 konvertering og dannelse af oxidlag (korrosion, beskyttelse). SCR processen, der reducerer NO (NO_x) til frit kvælstof (N_2) vha. ammoniak (NH_3) er også et eksempel på en redox proces.



Desværre er kemikere ikke alt for konsekvente når de opskriver reaktionsskemaer og en del af de nødvendige forudsætninger udelades ofte fordi de anses for velkendte, hvilket som oftest er tilfældet kemikere imellem eller let klares ved en forespørgsel - andre kan have en anden opfattelse, men vil ved at spørge i de fleste tilfælde kunne få en tilfredsstillende forklaring.

Eksempelvis skriver kemikerne, som lige set, blot H^+ når de snakker om syretilsætning uden at angive hvilken syre f.eks. saltsyre (HCl) eller svovlsyre (H_2SO_4) der er tale om - årsagen er selvfølgelig at virkningen beror på protonen (H^+) og ikke på syren (protonkilden).

Et andet eksempel herpå er at der i det ovenstående tilsyneladende ret tilfældigt bruges to forskellige slags reaktionspile (\rightarrow og \leftrightarrow). Forklaringen er at nogle reaktioner i praksis går helt til højre, mens andre indstiller sig midt imellem. Mere herom i afsnittet om ligevægte.

Årsagen kan selvfølgelig også være at reaktionen kun er delvist kendt og at reaktionsskemaet repræsenterer en ufuldstændig arbejdsmodel.

2.2.4 Blandinger og koncentrationsangivelser

Naturligt forekommende stof er næsten altid en blanding af forskellige stoffer og man har behov for at kunne angive, hvor stort indholdet af de enkelte stoffer er i f.eks. kul, aske, luft, vand, røggas, gips osv.

Man skelner imellem homogene og heterogene blandinger. Heterogene blandinger kan i princippet adskilles i homogene delblandinger ved sortering mens dette ikke er muligt for homogene blandinger. Kedelvand, partikelfri røggas og luft er eksempler på homogene blandinger, mens kul, aske og mange konstruktionsmaterialer er eksempler på heterogene blandinger.

Koncentrationsangivelser for homogene og heterogene blandinger afviger ikke fra hinanden idet de altid udtrykker hvad indholdet af et nærmere angivet specium (grundstof, molekyle, stof, fase etc.) er pr. enhed af blandingen, den såkaldte basis, der af og til begrænses til at omfatte en veldefineret del af blandingen, som f.eks. tørstofindholdet (TS) eller for kul den askefri del.

Som basis benyttes i de fleste tilfælde volumen eller masse, svarende til hvad der i praksis umiddelbart kan måles. Da blandinger, undtagen partikelblandinger, har en massefylde, der er veldefineret og er let at måle kan koncentrationsangivelser på vægtbasis som oftest let omsættes til volumenbasis og visa versa - den mest entydige basis er dog vægtbasis.

For fortyndede vandige opløsninger benyttes L dog ofte som (volumen)basis, men i praksis er massefylden af fortyndede vandige opløsninger 1 kg/L således at koncentrationsangivelser pr. L og pr. kg for fortyndede vandige opløsninger er ens.

Kemikerne bruger desuden af og til mol som basis - især for simple veldefinerede blandinger med få komponenter, f.eks. luft og røggas.

For gasser er det almindeligt at bruge normalkubikmeter (angives f.eks. som: Nm³, m₀³, m³(i.N.) eller m³(s.t.p.)) - 1 Nm³ er præcis 44,6 mol. Normalkubikmeteren hænger altså entydigt sammen med molbegrebet og fordelingen ved at benytte normalkubikmeter i stedet for mol er at det med kendskab til gassens tryk og temperatur er enkelt at omsætte til/fra det aktuelle gasvolumen.

Som mål for indholdet af et bestemt specium (grundstof, molekyle, stof, fase etc.) i en blanding benyttes næsten udelukkende massen eller antallet af mol og man får typiske koncentrationsangivelser som angivet i tabellen. Det er brugen af mol (antallet), der gør det muligt for kemikerne at benytte sig af de kemiske reaktionsskemaer og derved forstå og fortolke opnåede resultater.

	Basis	Typiske enheder
Væsker	Vægt: t, kg, g Volumen: m ³ , L, ml Mol: mol	kg/kg, %=0,01, ‰=0,001=g/kg, ppm=10 ⁻⁶ =mg/kg, ppb=10 ⁻⁹ =µg/kg mol/g, mol/kg=m(olal) g/L mol/L=M(olær); vandige opløsninger: ppm≈mg/L og ppb≈µg/L (mol/mol, %, ‰, ppm, ppb)
Faststoffer	Vægt: t, kg, g	kg/kg, %=0,01, ‰=0,001=g/kg, ppm=10 ⁻⁶ =mg/kg, ppb=10 ⁻⁹ =µg/kg
Gasser	Mol: Nm ³ , mol	mg/Nm ³ mol/mol, %, ‰, ppm, ppb

For veldefinerede kemiske stoffer med en kendt molvægt kan man omregne imellem masse og mol - da molvægten af klor (Cl) er 35,5 g/mol kan et indhold på 75 mg/L klorid (Cl) i råvand omsættes til 0,0021 mol/L ($\frac{75 \text{ mg/L}}{35,5 \text{ g/mol}}$). For et kemisk udefineret stof som støv er dette ikke muligt og et støvindhold på 30 mg/Nm³ kan ikke omsættes til et antal mol/Nm³.

Det bemærkes at der er mulighed for at gå galt i byen med hensyn til brug af %, ‰, ppm og ppb idet disse kun angiver en ti potens kg/kg eller mol/mol - i praksis er det kg/kg for væsker og mol/mol for gasser, hvis ikke der tydeligt er angivet andet.

Udenfor kemikernes verden ses mange andre mål for stofindhold. Indholdet af forskellige stoffer i kul kan f.eks. opgives i mg/MJ, hvor indholdet ved hjælp af kullets brændværdi relateres til energiindholdet. Den type blandede enheder kræver ofte påpasselighed med hensyn til de præcise forudsætninger og definitioner inden rapporterede værdier kan benyttes.

Endelig er der selvfølgelig altid problemet med enheder, som man kun sjældent støder på f.eks. lb (pound), Btu (British thermal unit), scf (standard cubic feet), psi (pounds per square inch) etc.

2.2.5 Specielle koncentrationsangivelser

Koncentrationen af visse stoffer har i nogle anvendelser så stor betydning, at man har fundet det praktisk at arbejde med alternative koncentrationsmål til de ovenfor nævnte.

I vandige opløsninger har koncentrationen af brintioner ($H^+(aq)$) meget stor indflydelse på mange kemiske reaktioner, herunder f.eks. biologisk aktivitet, der jo foregår i vand. Da brintionkoncentrationen desuden varierer meget har man indført **pH begrebet**, der ikke helt videnskabeligt korrekt, men til de fleste praktiske formål er den negative værdi af titalologaritmen til brintionkoncentrationen målt i mol/L, eller som formel:

$$pH \equiv -\log_{10}(c_{H^+})$$

Fra dagligdagen har man f.eks. at pH for regnvand kan være omkring 4 mens pH for kedelvand f.eks. kunne være 9,5 - angivelser der bl.a. er noget mere skrivevenlige end de tilsvarende koncentrationer på henholdsvis 0,0001 M (10^{-4} M) og 0,00000000032 M ($3,2 \cdot 10^{-10}$ M = $10^{-9,5}$ M).

Det lille p i pH betyder altså "-log₁₀" og benævnes p-operatoren - denne benyttes også i andre sammenhænge f.eks. til angivelse af iltindhold (pO_2), indholdet af hydroxidioner (OH^- , pOH) og angivelse af ligevægts-, syre og basekonstanter (pK , pK_a og pK_b) som vi skal se senere.

Når man arbejder med vand, der skal opvarmes i vaskemaskiner, varmtvandsbeholdere, central- og fjernvarmekedler og kraftværkskedler, har hårdheden, der hænger sammen med indholdet af calciumioner (Ca^{2+}) og magnesiumioner (Mg^{2+}) stor betydning.

Man arbejder med **hårdhedsgrader**, der benævnes **dH°**. Vand med en hårdhed på 1 dH° har et samlet indhold af magnesium- og calciumioner på $1,79 \cdot 10^{-4}$ M, hvilket svarer til et calciumoxidindhold (CaO) på 10 mg/L.

For meget rent vand er man ikke altid særlig interesseret i hvad det præcise indhold af forskellige ioner er, men kan nøjes med en indikation af det samlede ionindhold. Hertil kan ledningsevnen benyttes. En af fordelene herved er at udstyr til ledningsevne måling er forholdsvis robust og giver pålidelige målinger. Som

Vandkvalitet	Direkte ledningsevne (L)
Ultrarent vand	0,055 μ S/cm
Spædevand	<0,1 μ S/cm
Kondensat	5-10 μ S/cm
Råvand/boringsvand (ENV)	4-500 μ S/cm
Havvand (Aabenrå)	35 mS/cm
Absorberslurry (ESK)	50 mS/cm

symbol for den direkte ledningsevne benytter man L og måleenheden er S/cm, der imidlertid er en ret stor enhed og man ser ofte enhederne μ S/cm og mS/cm benyttet. I tabellen er typiske ledningsevner for forskellige vandkvaliteter, der findes på et kraftværk angivet.

Sammenhængen imellem ionkoncentrationerne og ledningsevnen i fortyndede opløsninger er:

$$L = \sum_{\text{ioner}} c_i \lambda_i = \sum_{\text{kationer}} c_i \lambda_i + \sum_{\text{anioner}} c_i \lambda_i$$

hvor L er ledningsevnen, c_i er koncentrationen af ionen i og λ_i er den specifikke molære ledningsevne for ionen i. Værdier af λ_i for nogle væsentlige ioner ved 25 °C er angivet i tabellen.

Ion	$\lambda_i - \frac{\text{mS/cm}}{\text{mol/L}}$
Kationer:	
H ⁺	350
NH ₄ ⁺	74,5
Na ⁺	50,9
Ca ²⁺	120
Anioner:	
OH ⁻	192
Cl ⁻	75,5
SO ₄ ²⁻	158

Det bemærkes at protonen (H⁺) har en speciel høj værdi af λ_i . Dette udnyttes i forbindelse med den såkaldte sure ledningsevne, der betegnes L_K og er ledningsevnen målt efter at alle opløsningens kationer ved ionbytning er erstattet med protoner (H⁺).

De omtalte forhold udnyttes f.eks. til overvågning for saltindbrud i vand/damp kredsløbet.

Ammoniakkonditioneret kedelvand med et pH på 9,5 har på grund af den øgede koncentration af ammonium (NH₄⁺) og hydroxid (OH⁻) ioner en ledningsevne omkring 6 µS/cm - en saltvandsopløsning med 3 mg/L NaCl har en tilsvarende ledningsevne og det vil derfor være svært at opdage et mindre saltindbrud.

Måler man derimod den sure ledningsevne i henholdsvis ammoniakkonditioneret kedelvand og en saltvandsopløsning med 3 mg/L NaCl er der tydelig forskel.

Når den sure ledningsevne af ammoniakkonditioneret kedelvand måles erstattes ammoniumionerne (NH₄⁺) først af protoner (H⁺), der reagerer med hydroxidionerne (OH⁻) og danner vand (H⁺ + OH⁻ → H₂O) - det betyder at den sure ledningsevne i princippet kommer til at svare til ledningsevne af ultrarent vand (0,055 µS/cm).

Når natriumionerne (Na⁺) i saltvand erstattes med protoner (H⁺) dannes en saltsyreopløsning og ledningsevnen vokser fordi protonen (H⁺) har en meget større specifik molær ledningsevne end natriumionen (Na⁺) - for saltvandsopløsningen med 3 mg/L NaCl bliver den sure ledningsevne 20 µS/cm.

2.2.6 Ligevægtsbegrebet

Alle ved at man kan opløse salt i vand og kemikeren skriver f.eks: NaCl → Na⁺ + Cl⁻. Tilsvarende har man siden oldtiden indvundet salt fra havvand ved at inddampe saltvand således at saltkoncentrationen vokser til en grænse hvor saltkrystallerne udfældedes - i dette tilfælde skriver kemikeren den modsatte proces: Na⁺ + Cl⁻ → NaCl

En lidt nærmere analyse af hvad der sker når salt opløses eller udkrystalliserer fører kemikeren frem til at det er to sider af samme sag og han beskriver i nogle tilfælde begge processerne med den samme reaktionsligning: NaCl ↔ Na⁺ + Cl⁻.

I et almindeligt kemisk opslagsværk kan man desuden læse at saltopløseligheden (NaCl) i vand ved 20 °C er 360 g/L, men de fleste har nok på fornemmelsen at hvis de smider 360 g salt i 1 L vand så ser det i hvert tilfælde ikke umiddelbart ud som om det hele opløses, men de fleste udelukker dog ikke at det hele måske efter nogen tid alligevel er opløst. I samme opslagsværk kan man tillige konstatere at opløseligheden vokser med temperaturen.

Den systematiske baggrund for ovenstående eksempel er ligevægtsbegrebet og skelnen imellem reversible og irreversible reaktioner.

Først de **reversible** og **irreversible** reaktioner med udgangspunkt i eksemplet med opløsning af salt i vand.

Når vi tilsætter en beskeden mængde salt (NaCl) til vand opløses dette og forsvinder - der er ingen chance for at saltet gendannes som saltkrystaller og reaktionen betegnes som irreversibel og man benytter en enkeltrettet reaktionspil (\rightarrow).

Når vi har tilsat så meget salt, at der lige netop er et enkelt lille saltkrystal, der ikke kan opløses (opløsningen er mættet) kan vi ved at øge temperaturen lidt få saltkrystallet opløst eller ved en lille temperatursænkning få det til at vokse. Vi kan altså få reaktionen til at gå begge veje og reaktionen betegnes som reversibel - man benytter en dobbeltrettet reaktionspil (\leftrightarrow).

Ligevægtsbegrebet vedrører oplysningen om en saltopløselighed på 360 g/L ved 20°C. Dette tal opnås ved at tilsætte salt og vente i (uendelig) lang tid for at se om det nu også opløses helt. Når der lige netop er en enkelt lille krystal, der ikke opløses er saltopløseligheden nået og der er opnået en ligevægt imellem opløst salt og saltkrystallet, der ikke ændres med tiden. I praksis vil der hele tiden opløses salt, men en præcis lige så stor mængde vil samtidig udfældes og set udefra sker der ingen ændringer som tiden går - den reversible reaktion er i ligevægt.

Ligevægtssituationen er speciel derved, at den er tids- og apparaturafhængig og derfor kan måles og tabuleres en gang for alle. I praksis har man sjældent mulighed for at vente i (uendelig) lang tid og tiden får derfor indflydelse, men ligevægtssituationen repræsenterer grænsen for hvad der kan opnås/undgås eller må accepteres.

Her beskrives nogle vigtige termer og begreber vedrørende fase- og reaktionsligevægte, mens tidens indflydelse på kemiske reaktioners forløb betegnes kinetik og behandles i et senere afsnit.

Faseligevægte er ligevægte, der vedrører stofovergang imellem forskellige faser (gas, væske eller faststof) uden samtidig kemisk reaktion. Der er utallige eksempler fra kraftværkerne, hvor nogle er nævnt nedenfor.

Gas væske ligevægte:

Kondensation: Dampkondensation, vand- og svovlsyreudgipunkt i røggas og belægningsdannelse på overhederrør.

Fordampning: Dampdannelse.

Gasopløselighed: Oppløselighed af ammoniak (NH₃), kuldioxid (CO₂) og ilt (O₂) i kedelvand

Væske faststof ligevægte:

Smeltning: Aske- og belægningsdannelse.

Opløsning/udfældning: Saltopløselighed i kedelvand og opløselighed af kalk og gips.

I olieudskillere optræder der **væske væske ligevægte**.

I forbindelse med tungtopløselige salte anvendes et begreb som opløselighedsproduktet, der kort skal omtales her, mens yderligere information om faseligevægte må opsøges i speciallitteraturen f.eks. via den lokale kemiker.

Opløselighedsproduktet, der ofte betegnes L , for et tungtopløseligt salt er produktet af koncentrationen af de enkelte ioner opløftet til det antal, der indgår i saltet - dette illustreres lettest med et nogle eksempler, der optræder i forbindelse med våde afsvovlingsanlæg:

Gips: $L_{\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}} \equiv c_{\text{Ca}^{2+}} c_{\text{SO}_4^{2-}} = 2,5 \cdot 10^{-5}$

Kalksten: $L_{\text{CaCO}_3} \equiv c_{\text{Ca}^{2+}} c_{\text{CO}_3^{2-}} = 4,8 \cdot 10^{-9}$

Calciumflourid: $L_{\text{CaF}_2} \equiv c_{\text{Ca}^{2+}} c_{\text{F}^-}^2 = 3,4 \cdot 10^{-11}$

Koncentrationerne c_i af de enkelte ioner er her i mol/L og der vil udfælde salt hvis det angivne produkt af ionkoncentrationerne er større end opløselighedsproduktet mens saltet vil opløses når det modsatte er tilfældet.

Reaktionslignevægte er ligevægte, hvor der sker egentlig stofomdannelse, men der dannes samtidig ofte nye faser således at der samtidig optræder faselignevægte.

Når der er tale om reaktionslignevægte benytter kemikerne sig af den såkaldte ligevægtskonstant K , der er baseret på forholdet imellem produktkoncentrationerne opløftet til en potens svarende den støkiometriske koefficient i reaktionsligningen og de tilsvarende størrelser for reaktanterne.

Igen er det lettest at illustrere med nogle eksempler.

Tabellen illustrerer princippet i sammenhængen mellem reaktion og ligevægtskonstant.

Samtidig antydes det i tabellen at man oftest benytter partialtryk (p_i) som koncentrationsmål i gasfaser og at rent vand og rene faste stoffer tillægges en koncentration på én når de indgår i reaktionerne - igen må mere specifik information opsøges i speciallitteraturen.

Det er ligeledes antydet at man for syredissociation benytter betegnelsen K_a for ligevægtskonstanten og for baser tilsvarende K_b .

Størrelsen af ligevægtskonstanterne K_a og K_b varierer meget og man ser dem ofte tabuleret som henholdsvis pK_a og pK_b , hvor p står for den tidligere omtalte "p" operator ($-\log_{10}$). Værdier af pK_a og pK_b for udvalgte syrer og baser er vist i tabellen.

Jo mindre pK_a er jo mere villig er syren til at afgive en proton - negative værdier af pK_a betyder i praksis at syren altid er helt dissocieret.

Tabellen med pK_a og pK_b værdier forklarer samtidig hvorfor der tilsyneladende stadig er lidt inkonsekvens i brug af enkelt- og dobbelttredede reaktionspile. Ligevægtskonstanten for dissociation af svovlsyre (den første proton) er omkring 1000 (10^{-3}) - en så stor værdi at reaktionen i praksis er forskudt helt til højre svarende til en irreversibel reaktion, der normalt skrives med en enkelttredet reaktionspil. For andre reaktioner, hvor der kun er benyttet en enkelttredet reaktionspil er ligevægtskonstanterne tilsvarende enorme ved de temperaturer, hvor reaktionen normalt forløber.

Reaktion	Ligevægtskonstant
$\text{H}_2\text{SO}_4(\text{aq}) \rightarrow \text{H}^+(\text{aq}) + \text{HSO}_4^-(\text{aq})$	$K_a = \frac{c_{\text{HSO}_4^-} c_{\text{H}^+}}{c_{\text{H}_2\text{SO}_4}}$
$\text{HSO}_4^-(\text{aq}) \rightarrow \text{H}^+(\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-}(\text{aq})$	$K_a = \frac{c_{\text{SO}_4^{2-}} c_{\text{H}^+}}{c_{\text{HSO}_4^-}}$
$\text{NH}_3(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \leftrightarrow \text{NH}_4^+(\text{aq}) + \text{OH}^-(\text{aq})$	$K_b = \frac{c_{\text{NH}_4^+} c_{\text{OH}^-}}{p_{\text{NH}_3}}$
$\text{C}(\text{s}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g})$	$K = \frac{p_{\text{CO}_2}}{p_{\text{O}_2}}$
$\text{SO}_2(\text{g}) + \frac{1}{2} \text{O}_2(\text{g}) \leftrightarrow \text{SO}_3(\text{g})$	$K = \frac{p_{\text{SO}_3}}{p_{\text{SO}_2} p_{\text{O}_2}^{1/2}}$
$6 \text{NO}(\text{g}) + 4 \text{NH}_3(\text{g}) \rightarrow 5 \text{N}_2(\text{g}) + 6 \text{H}_2\text{O}(\text{g})$	$K = \frac{p_{\text{N}_2}^5 p_{\text{H}_2\text{O}}^6}{p_{\text{NO}}^6 p_{\text{NH}_3}^4}$
$\text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{g})$	$K = \frac{p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2\text{O}}^2}{p_{\text{CH}_4} p_{\text{O}_2}^2}$

Syre/base	pK_a/pK_b
Syrer:	
HCl (saltsyre)	≈ -7
H_2SO_4 (svovlsyre, 1. proton)	≈ -3
HSO_4^- (svovlsyre, 2. proton)	1,92
HF (flussyre)	3,45
HAc (eddikesyre)	4,76
H_2CO_3 (kulsyre, 1. proton)	6,37
Baser:	
NH_3	4,76
CO_3^{2-}	3,75

Vand i sig selv er også en syre med dissociationsreaktionen:



$$K_w = c_{\text{H}^+} \cdot c_{\text{OH}^-} = 10^{-14} \text{ eller } \text{p}K_w = 14$$

Denne vigtige reaktion kaldes vands autoprotolyse og bevirker at koncentrationerne af protoner (H^+) og hydroxidioner (OH^-) ikke er uafhængige. Benyttes den tidligere omtalte "p" operator ($-\log_{10}$) udtrykkes ligevægtskonstanten for vands autoprotolyse med formelen: $\text{pH} + \text{pOH} = 14$

For ligevægtsreaktioner er det nyttigt at vide i hvilken retning ligevægten forskydes når reaktionsbetingelserne ændres. Hertil benyttes **le Chateliers princip**, der er en verbal formulering af de underliggende termodynamiske sammenhænge og f.eks. kan formuleres som i tekstboksen og er uddybet i tabellen.

Le Chateliers princip:

Når reaktionsbetingelserne for en ligevægtsreaktion ændres vil reaktionen forsøge at modvirke disse ændringer

Konsekvenser af le Chateliers princip

Ændring	Konsekvens
Reaktantkoncentration	Øget reaktantkoncentration forskyder ligevægten imod produktsiden (mod højre).
Produktkoncentration	Øget produktkoncentration forskyder ligevægten imod reaktantsiden (mod venstre).
Temperatur	Exoterme (varmeudviklende) reaktioner forskydes imod venstre ved forøget temperatur. Endoterme (varmeforbrugende) reaktioner forskydes imod højre ved forøget temperatur.
Tryk	Kun reaktioner hvori der indgår gasser påvirkes nævneværdigt af trykændringer. En trykøgning forskyder reaktionen i retning af færre gasmolekyler (mindre volumen).

2.2.7 Reaktionshastigheder/kinetik

Som tidligere angivet er opløseligheden af salt (NaCl) i vand 360 g/L ved 20 °C, men hvis man tilsætter 360 g salt til en liter 20 °C varmt vand vil saltet ikke umiddelbart opløses - det tager lidt tid.

Hvis man laver lidt flere forsøg vil man opdage at den tid det tager at opløse 360 g salt i en liter vand også afhænger af om det er groft eller fint salt og hvorvidt man har omrøring eller ej og hvor kraftig en eventuel omrøring er.

Hvis man bliver endnu mere nysgerrig og f.eks. tilsætter 10 g salt af gangen vil man opdage at de første saltportioner opløses væsentlig hurtigere end de sidste, men hver eneste gang man forsøger, at tilsætte mere end 360 g/L vil man opdage at overskudet ikke opløses selvom man venter meget længe.

Den tid det tager at opløse saltet afhænger altså af mange forskellige ting mens den mængde, der kan opløses er konstant, svarende til den allerede omtalte ligevægtssituation.

I en reaktor, hvor man med fastholdte driftsbetingelser gennemfører en kemisk reaktion kan det opnåede resultat i mange tilfælde omsættes til en reaktionshastighed for den kemiske reaktion. Denne reaktionshastighed benævnes den observerede reaktionshastighed og det er tit et mål i sig selv at få en høj (observeret) reaktionshastighed - en højere reaktionshastighed betyder alt andet lige et mindre behov for reaktionstid (opholdstid) og dermed en mindre (billigere) reaktor. Reaktoren kan i den forbindelse f.eks. være fyrrummet, en del af en røggaskanal eller et decideret reaktionskammer som f.eks. en SCR-reaktor, et absorptionstårn eller en afsvovlingssump.

Den observerede reaktionshastighed er imidlertid en meget kompleks størrelse, hvis afhængighed af driftsbetingelserne ofte kun kan fastlægges ved omfattende forsøg og større opskaleringer kræver fornyet forsøgsindsats.

På et overordnet niveau påvirkes den observerede reaktionshastighed udover af reaktionshastigheden af de kemiske reaktioner direkte eller indirekte af varme- og massetransportforholdene.

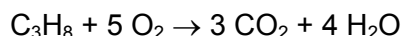
Indflydelsen af massetransportforholdene kan illustreres med udbrændingen af kokspartikler, hvortil der kræves ilt (O_2) på reaktionsstedet i kokspartiklens indre. Ilt skal altså transporteres fra fyrrummet igennem grænselaget omkring kokspartiklen og videre igennem partiklens poresystem - disse transportprocesser drives af koncentrationsforskelle, men påvirkes også af faktorer som partikelstørrelsen, -formen og porestrukturen.

Varmetransport har f.eks. betydning ved pyrolyse af kulpartikler, hvor kullet flygtige bestanddele afdrives. Disse processer tager først fart ved temperaturer over $400\text{ }^\circ\text{C}$ og opvarmningstiden fra koldt kul til $400\text{ }^\circ\text{C}$ får derfor betydning - varmeoverførsel styres af temperaturforskelle.

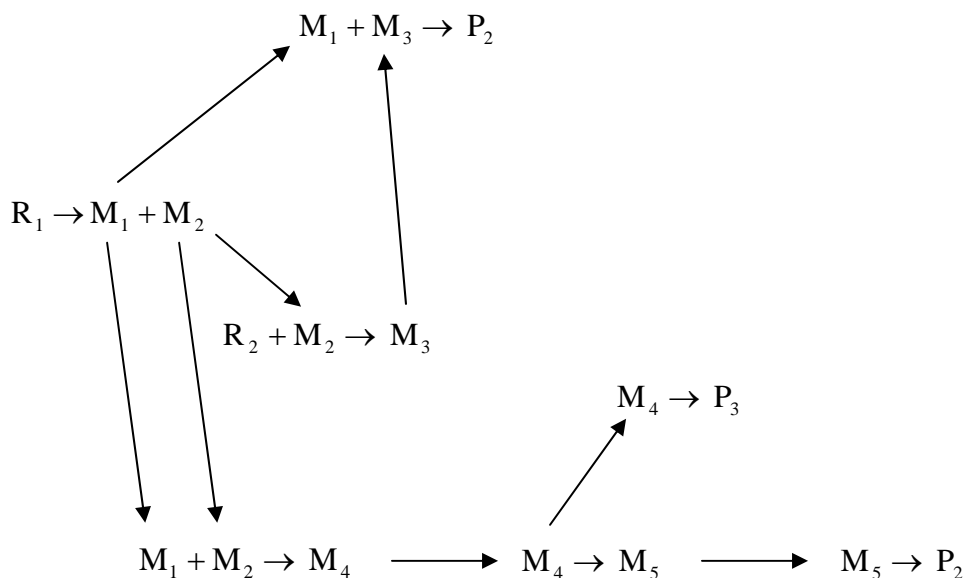
Varmetransport har desuden betydning for reaktionstemperaturen, der er den enkeltparameter, der har størst indflydelse på hastigheden af selve den kemiske reaktion.

Reaktionshastigheden for selve den kemiske reaktion er en meget kompleks størrelse.

Når man opskriver reaktionsskemaet for en kemisk reaktion, f.eks. afbrændingen af propan (C_3H_8):



repræsenterer denne det overordnede resultat af den kemiske reaktion, men sjældent en faktisk forekommende reaktion - man kan ikke forestille sig at 1 propan molekyle (C_3H_8) og 5 ilt molekyler (O_2) skal støde sammen for at reaktionen kan forløbe.



Det simple overordnede billede som reaktionsskemaet repræsenterer dækker ofte over et kompliceret billede af delreaktioner. Man skal forestille sig at en kemisk reaktion - hvor reaktanter (R_1, R_2, \dots) reagerer og bliver til produkterne (P_1, P_2, \dots) - forløber via et netværk af reaktioner, hvor der optræder forskellige mellemprodukter (M_1, M_2, \dots). Mellemprodukterne kan være kendte og stabile forbindelser, som umiddelbart kan registreres, men termer som radikaler og aktiverede komplekser, hører også hjemme i denne del af kemien, der går under betegnelsen reaktionskinetik. Radikaler og aktiverede komplekser er ustabile og højreaktive molekyler med kort levetid. I forbrændingskinetik har radikaler som f.eks. $\cdot OH$, $\cdot O$ og $\cdot CH_3$, der er karakteriserede ved at have ufuldstændigt opfyldte elektronskaller stor betydning og indenfor enzymkinetikken foregår reaktionen ofte via et aktiveret kompleks f.eks. $(E \cdot S)^*$ imellem enzymet (E) og substratet (S) - reaktanter kaldes substrater i enzymkemien.

Reaktionshastigheden for den ønskede reaktion afhænger af reaktionshastighederne af de enkelte delreaktioner, der fører til de ønskede produkter, og ved uheldige reaktionsbetingelser er der risiko for at reaktionsvejen ændres så det ønskede produkt ikke opnås (lavere udbytte, mindre renhed ...). På illustrationen kan man f.eks. forestille sig at man er interesseret i at fremstille produktet P_2 ud fra reaktanten R_1 , der desværre kun er tilgængelig i en blanding med R_2 og at P_2 er det termodynamisk favoriserede slutprodukt i den aktuelle blanding. Hvis reaktionen imellem M_2 og R_2 er meget hurtigere end reaktionen imellem M_1 og M_2 vil det uønskede produkt P_1 dannes på trods af at termodynamikken udsiger at det er P_2 der er stabilt.

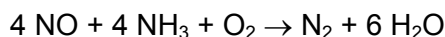
Dette har stor betydning idet man skal gøre sig klart, at der med givne udgangsstoffer (reaktanter) ved givne betingelser som oftest eksisterer et antal mulige reaktioner (parallelreaktioner) og at de i første omgang dannede produkter vil kunne danne grundlag for nye reaktioner (seriereaktioner). Den resulterende produktblanding bestemmes af dette netværk af mulige parallel- og seriereaktioner, reaktionshastigheden af de forskellige reaktionsveje og begrænses i sidste ende af den termodynamiske ligevægtstilstand.

Kendskab til reaktionskinetik er vigtigt for at være i stand til at optimere reaktionsbetingelserne - speede de langsomme delreaktioner op, fjerne blokeringer og undertrykke uønskede reaktioner og derved få netop den reaktion man er interesseret i til at forløbe, måske endda i en termodynamisk ufavorabel retning.

Et eksempel, hvor reaktionshastigheden bliver dominerende er reaktionen imellem nitrogenoxid (NO) og ilt (O₂), der danner nitrogendioxid (NO₂) efter $\text{NO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2$. Ved forbrændings-temperaturer er ligevægtsforholdet imellem NO og NO₂ omkring 95:5, mens det ved omgivelsetemperatur snarere er omvendt - på trods heraf er forholdet imellem NO og NO₂ i kold røggas omkring 95:5. Årsagen er at reaktionshastigheden for reaktionen, der omdanner nitrogenoxid (NO) til nitrogendioxid (NO₂) er forsvindende ved lave temperaturer og derfor opnås, der ikke ligevægt.

Reaktionshastigheder stiger i reglen eksponentielt med temperaturen og for mange reaktioner fordobles reaktionshastigheden for hver gang temperaturen øges 10 °C.

Hvis man ønsker en høj reaktionshastighed for en given reaktion, f.eks. reduktion af NO med NH₃ efter:



er det måske muligt, at opnå den ønskede effekt ved blot at øge temperaturen til et passende niveau. Det kan imidlertid vise sig at den nødvendige temperaturforøgelse i praksis giver anledning til uønsket mæssigheder. F.eks. kan man for ligevægtsreaktioner få forskudt reaktionen mod reaktantsiden, uønskede reaktioner kan begynde at forløbe eller blive for dominerende og/eller det nødvendige temperaturniveau kommer til at stille urimelige krav til f.eks. konstruktionsmaterialerne.

I sådanne tilfælde kan løsningen ofte være, at man finder/benytter en egnet katalysator - en katalysator er et stof der øger reaktionshastigheden for en kemisk reaktion uden selv at blive forbrugt.

Grundlæggende virker en katalysator ved at reaktionsvejen ændres til en hurtigere reaktionsvej, hvori katalysatoren indgår i et eller flere mellemtrin.

Den allerede nævnte reaktion, hvor NO reduceres med NH₃ udnyttes i praksis i den såkaldte SNR deNO_x-proces, hvor ammoniak indsprøjtes i fyrrummet ved temperaturer omkring 1000°C, men akkurat den samme reaktion bringes med en katalysator til at forløbe ved temperaturer omkring 400°C i SCR deNO_x-processen.

Et andet eksempel er SO₂ konverteringen til SO₃, der ved almindelige fyrrumstemperaturer er på 1-2 %, men i SNOX anlæggets katalytiske SO₂ konverter er næsten 100 % ved kun godt 400°C.

Ud over at forøge reaktionshastigheden er det ofte ved hjælp af katalysatorer muligt at fremelske ønskede reaktioner på bekostning af uønskede reaktioner - katalysatorerne er selektive.

2.3 Resumé

Læseren skulle gerne, efter at have gennemlæst ovenstående ufuldstændige og summariske introduktion til den almene og fysiske kemi, sidde tilbage med en forståelse for, i det mindste nogle af kemikernes fagudtryk og en fornemmelse af, at kemikernes ufrivilligt upræcise svar måske alligevel kan være medvirkende til forståelsen af vigtige årsagssammenhænge.

Det starter simpelt med en konstatering af at massen i kemikerens verden er konstant - stof kan ikke forsvinde og stof kan ikke opstå.

Men der er myriader af forskellige stoffer og de kan omdannes til andre stoffer eller ændre form og tilstand.

Kemikernes byggeklodser er de ≈ 90 forskellige grundstoffer (atomer), der med forskellige bindingstyper kan bindes sammen til myriader af kemiske forbindelser (stof), der for det meste optræder som blandinger.

En del af kemikerens opgave er derfor at beskrive hvilke stoffer, der er til stede og mængden (koncentrationen) af disse.

En anden opgave affødes af at stof ved reaktioner kan omdannes til andre stoffer eller kan ændre form og tilstand, men så længe der er tale om stabile ligevægtsforhold kan opgaven i princippet løses og årsagssammenhængene kan beskrives en gang for alle. Det altovervejende problem er det enorme antal muligheder, der gør at det kun er en brøkdel af årsagssammenhængene der allerede er beskrevet.

Når kemiske reaktioner i praksis skal udnyttes til at omdanne stoffer til andre stoffer kompliceres kemikerens opgave af, at reaktioner og tilstandsændringer foregår med en endelig (reaktions)hastighed og f.eks. påvirkes af masse- og varmetransportfænomener - altså at udformningen af det mekaniske procesudstyr (reaktorer, fordampere, krystalisatorer, varmevekslere etc) tillige får betydning. På dette område er den tilgængelige viden ofte så beskedent, at det kun er muligt at beskrive og forstå årsagssammenhængene på basis af erfaringer fra og forsøg med eksisterende (pilot)anlæg.

Selvom "odds" tilsyneladende er dårlige er det håbet at denne introduktion til almen og fysisk kemi alligevel har givet læseren mod på at diskutere kemiske problemstillinger med den lokale kraftværkskemiker og at man har fået en bedre forståelse af kemikernes begrebsverden.

Din kraftværkskemiker er parat!

Er du?

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

<http://www.kuf-split.hr/periodni/en/>

GROUP

1 **IA**

2 **IIA**

3 **IIIB**

4 **IVB**

5 **VB**

6 **VIB**

7 **VIB**

8 **VIB**

9 **VIB**

10 **VIB**

11 **IB**

12 **IB**

13 **IIIA**

14 **IIIA**

15 **VA**

16 **VIA**

17 **VIA**

18 **VIIIA**

PERIOD

1

2

3

4

5

6

7

RELATIVE ATOMIC MASS (A_r)

GROUP IUPAC

GROUP CAS

ATOMIC NUMBER

SYMBOL

ELEMENT NAME

Legend:

- Metal
- Semimetal
- Nonmetal
- 1 Alkali metal
- 2 Alkaline earth metal
- Transition metals
- Lanthanide
- Actinide
- 16 Chalcogens element
- 17 Halogens element
- 18 Noble gas

STANDARD STATE (25 °C, 101 kPa)

■ Ne - gas ■ Fe - solid

■ Ga - liquid ■ Ts - synthetic

1 1.0079 H HYDROGEN	2 4.0026 He HELIUM																
3 6.941 Li LITHIUM	4 9.0122 Be BERYLLIUM	5 10.811 B BORON	6 12.011 C CARBON	7 14.007 N NITROGEN	8 15.999 O OXYGEN	9 18.998 F FLUORINE	10 20.180 Ne NEON										
11 22.990 Na SODIUM	12 24.305 Mg MAGNESIUM	13 26.982 Al ALUMINIUM	14 28.086 Si SILICON	15 30.974 P PHOSPHORUS	16 32.065 S SULPHUR	17 35.453 Cl CHLORINE	18 39.948 Ar ARGON										
19 39.098 K POTASSIUM	20 40.078 Ca CALCIUM	21 44.956 Sc SCANDIUM	22 47.867 Ti TITANIUM	23 50.942 V VANADIUM	24 51.996 Cr CHROMIUM	25 54.938 Mn MANGANESE	26 55.845 Fe IRON	27 58.933 Co COBALT	28 58.933 Ni NICKEL	29 63.546 Cu COPPER	30 65.39 Zn ZINC	31 69.723 Ga GALLIUM	32 72.64 Ge GERMANIUM	33 74.922 As ARSENIC	34 78.96 Se SELENIUM	35 79.904 Br BROMINE	36 83.80 Kr KRYPTON
37 85.468 Rb RUBIDIUM	38 87.62 Sr STRONTIUM	39 88.906 Y YTTRIUM	40 91.224 Zr ZIRCONIUM	41 92.906 Nb NIObIUM	42 95.94 Mo MOLYBDENUM	43 (98) Tc TECHNETIUM	44 101.07 Ru RUTHENIUM	45 102.91 Rh RHODIUM	46 106.42 Pd PALLADIUM	47 107.87 Ag SILVER	48 112.41 Cd CADMIUM	49 114.82 In INDIUM	50 118.71 Sn TIN	51 121.76 Sb ANTIMONY	52 127.60 Te TELLURIUM	53 126.90 I IODINE	54 131.29 Xe XENON
55 132.91 Cs CAESIUM	56 137.33 Ba BARIUM	57-71 La-Lu Lanthanide	72 178.49 Hf HAFNIUM	73 180.95 Ta TANTALUM	74 183.84 W TUNGSTEN	75 186.21 Re RHENIUM	76 190.23 Os OSMIUM	77 192.22 Ir IRIDIUM	78 195.08 Pt PLATINUM	79 196.97 Au GOLD	80 200.59 Hg MERCURY	81 204.38 Tl THALLIUM	82 207.2 Pb LEAD	83 208.98 Bi BISMUTH	84 (209) Po POLONIUM	85 (210) At ASTATINE	86 (222) Rn RADON
87 (223) Fr FRANCIUM	88 (226) Ra RADIUM	89-103 Ac-Lr Actinide	104 (261) Rf RUTHERFORDIUM	105 (262) Db DUBNIUM	106 (266) Sg SEABORGIUM	107 (264) Bh BOHRVIUM	108 (277) Hs HASSIUM	109 (268) Mt MEITNERIUM	110 (281) Uun UNUNNIUM	111 (272) Uuu UNUNUNIUM	112 (285) Uub UNUBIUM	114 (289) Uuq UNUNQUADIUM					

LANTHANIDE

57 138.91 La LANTHANUM	58 140.12 Ce CERIUM	59 140.91 Pr PRASEODYMIUM	60 144.24 Nd NEODYMIUM	61 (145) Pm PROMETHIUM	62 150.36 Sm SAMARIUM	63 151.96 Eu EUROPIUM	64 157.25 Gd GADOLINIUM	65 158.93 Tb TERBIUM	66 162.50 Dy DYSPROSIUM	67 164.93 Ho HOLMIUM	68 167.26 Er ERBIUM	69 168.93 Tm THULIUM	70 173.04 Yb YtterBIUM	71 174.97 Lu LUTETIUM
--	-------------------------------------	---	--	--	---------------------------------------	---------------------------------------	---	--------------------------------------	---	--------------------------------------	-------------------------------------	--------------------------------------	--	---------------------------------------

ACTINIDE

89 (227) Ac ACTINIUM	90 232.04 Th THORIUM	91 231.04 Pa PROTACTINIUM	92 238.03 U URANIUM	93 (237) Np NEPTUNIUM	94 (244) Pu PLUTONIUM	95 (243) Am AMERICIUM	96 (247) Cm CURIUM	97 (247) Bk BERKELIUM	98 (251) Cf CALIFORNIUM	99 (252) Es EINSTEINIUM	100 (257) Fm FERMIUM	101 (258) Md MENDELEVIUM	102 (259) No NOBELIUM	103 (262) Lr LAWRENCIUM
--------------------------------------	--------------------------------------	---	-------------------------------------	---------------------------------------	---------------------------------------	---------------------------------------	------------------------------------	---------------------------------------	---	---	--------------------------------------	--	---------------------------------------	---

(1) Pure Appl. Chem., 73, No. 4, 697-683 (2001)
Relative atomic mass is shown with five significant figures. For elements with no stable nuclides, the value enclosed in brackets indicates the mass number of the longest-lived isotope of the element.
However three such elements (Tl, Pa, and U) do have a characteristic terrestrial isotopic composition, and for these an atomic weight is tabulated.

Editor: Aditya Vardhan (adivard@nettlix.com)

Copyright © 1998-2003 ENIG (enig@kf-split.hr)

Er naturgas virkelig så meget bedre end kul med hensyn til CO₂ emission?**Naturgas:**

Her vil vi antage at naturgas er ren methan (CH₄) selvom det kun udgør omkring 90 % af dansk naturgas

- 1: Opskriv forbrændingsreaktionen for naturgas, hvor methan reagerer med ilt og danner vand og kuldioxid.
- 2: Hvad er molvægtene af CH₄, O₂, CO₂ og H₂O?
- 3: Forbrændingsvarmen for methan er 803 kJ/mol – hvor mange mol CO₂ frigives pr. kJ ved forbrænding af methan? Hvor mange g?

Kul:

Kulsubstansen i kraftværkskul kan til overslagsberegninger antages at være "CH".

- 4: Opskriv forbrændingsreaktionen, hvor "CH" reagerer med ilt og danner vand og kuldioxid.
- 5: Hvad er molvægten af kulsubstansen ("CH") i kraftværkskul? Hvor mange mol kulsubstans ("CH") er der i 1 kg kraftværkskul når vandindholdet er 10 % og askeindholdet er 12 %?
- 6: Hvor mange mol CO₂ dannes ved afbrænding af 1 kg kraftværkskul? Hvor mange g?
- 7: Brændværdien af kraftværkskul er 25,6 MJ/kg – hvor mange mol CO₂ frigives pr. kJ ved forbrænding af kraftværkskul? Hvor mange g?
- 8: Hvad konkluderer du heraf?