

Зразок рішення відкритого завдання 8
Теорія до рішення знаходиться в лекціях 9 і 10

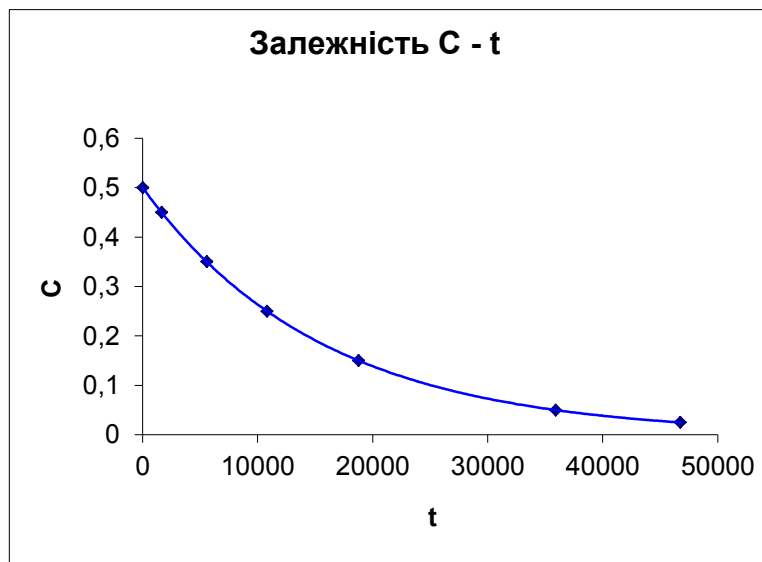
Розрахунки проведемо для наступних даних:

n	k_0	T, K	E_a , КДж/моль	C_0 , моль/л	Зменшення E_a , %
1	$3,2 \cdot 10^{11}$	760	228,4	0,5	2

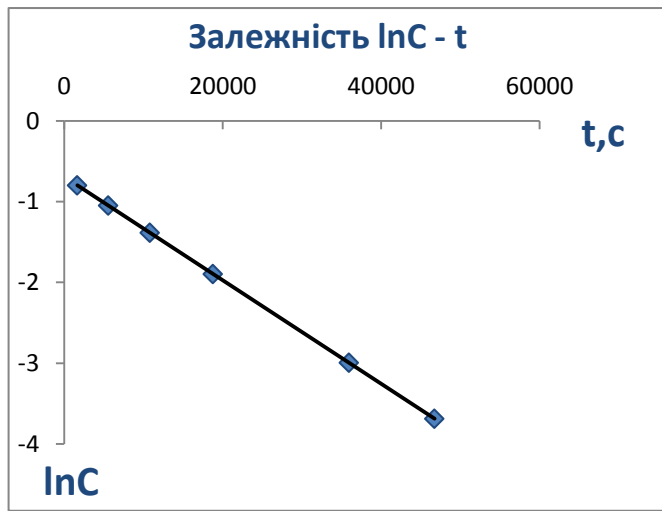
- Розрахунок константи швидкості проведемо за рівнянням Арреніуса: $k = k_0 \exp(-E_a/RT) = 3,2 \cdot 10^{11} \exp(-228400/8,314 \cdot 760) = 6,41 \cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$. Не забудьте перевести енергію активації в Дж/моль.
- Дана реакція за умовою відноситься до реакцій першого порядку ($n = 1$). Уважно вивчіть всі кінетичні закономірності для реакції вашого порядку і випишіть необхідні формули. Для реакції першого порядку це: $C = C_0 \exp(-kt)$ (1); $k = \ln(C_0/C)/t$ (2); $\tau_{1/2} = 0,693/k$ (3). (Для реакцій інших порядків в лекції 9 слід знайти інші формули).

Далі слід самому вибрати шість довільних концентрацій в інтервалі від 0 до C_0 . При цьому крайні точки повинні відрізнятись не менш ніж у 100 разів. Використовуючи обрані значення C за формулою 2 розраховуємо значення часу t , що відповідають кожній концентрації C . Дані такого розрахунку зручно представити у вигляді таблиці Excel, за даними якої будуюмо графік $C = f(t)$. При побудові графіка додаємо точку $t = 0, C = C_0$.

C, моль/л	0,45	0,35	0,25	0,15	0,05	0,025
t, c	1644	5564	10814	18783	35922	46735



- Розрахунки часу напівперетворення за графіком виконуємо наступним чином. Через точку $C_0/2$ на осі ординат проводимо горизонталь до перетину з кривою. З точки перетину опускаємо перпендикуляр на вісь часу до перетину з нею. Це і є час полупревращения. У нашому випадку з графіка $\tau_{1/2} \sim 11\ 000$ c. Розрахунок за формулою (3) дає $\tau_{1/2} = 10814$ c.
- Підтверджуємо перший порядок реакції.
 - Для цього будуюмо графік (в Excel) в координатах $\ln C - t$.



Бачимо, що всі крапки укладаються на пряму в обраних координатах. Це підтверджує даний порядок реакції $n = 1$.

б) За формулою для константи швидкості реакції першого порядку $k = \frac{1}{t} \ln C_0 / C$ розраховуємо шість значень k для всіх моментів часу.

C	t	lnC	k, c ⁻¹
0,45	1644	-0,79851	6,41E-05
0,35	5564	-1,04982	6,41E-05
0,25	10814	-1,38629	6,41E-05
0,15	18783	-1,89712	6,41E-05
0,05	35922	-2,99573	6,41E-05
0,025	46735	-3,68888	6,41E-05

Всі шість значень k однакові. Це підтверджує відповідність заданого порядку обраної формулі.

5. Розрахунок проводимо з використанням рівняння Арреніуса. Записуємо: $k_1 = k_0 \exp(-E_{a1}/RT)$ і $k_2 = k_0 \exp(-E_{a2}/RT)$. У нашому випадку $E_{a2} = 0,98E_{a1}$ (енергія активації знижена на 2%). Знаходимо відношення $k_2/k_1 = 2,06$. Це і є відповідь на питання п.4, тобто при зниженні енергії активації на 2% швидкість реакції зросте в 2,06 рази.