

Зразок рішення відкритого завдання 9
Теорія до рішення знаходиться в лекції 10

Вихідні дані

Варіант	T ₁	T ₂	T ₃	k ₁	k ₂
00	500	550	570	0,155	255

Методичні вказівки до рішення

- 1 Для двох даних температур запишіть рівняння Арреніуса і вирішіть систему з двох рівнянь. Розрахуйте E_a і k₀.

$$k_T = k_0 \exp(-E_a / RT)$$

$$k_1 = k_0 \exp(-E_a / RT_1) \quad (1)$$

$$k_2 = k_0 \exp(-E_a / RT_2) \quad (2)$$

Ділимо перше рівняння на друге і отримуємо $k_1/k_2 = \exp[E_a/R(1/T_2 - 1/T_1)]$. Логарифмуємо ліву і праву частини рівняння і отримуємо $\ln(k_1/k_2) = (E_a/R) \cdot (1/T_2 - 1/T_1)$. Підставляємо відомі величини і знаходимо $E_a = 8,314 \cdot \ln(0,155/255) / (1/550 - 1/500) = 338636 \text{ Дж}$. Записуємо рівняння Арреніуса для T₁ і розраховуємо k₀.

$$k_0 = 0,155 / \exp(-338636 / (8,314 \cdot 500)) = 3,704 \cdot 10^{34}$$

$$\text{Розраховуємо } k_3 = 3,704 \cdot 10^{34} \exp(-338636 / (8,314 \cdot 570)) = 3428.$$

2 Перевіряючи правило Вант-Гоффа, розрахуйте три значення температурного коефіцієнта, використовуючи попарно значення k для трьох температур. Висновок зробіть по середньому значенню.

$$\gamma^n = k_2/k_1 \quad n = (T_2 - T_1)/10 = 50/10 = 5. \quad \gamma^5 = 255/0,155 = 1645. \quad \gamma = 4,40.$$

$$\gamma^m = k_3/k_1 \quad m = (T_3 - T_1)/10 = 70/10 = 7. \quad \gamma^7 = 3428/0,155 = 1645. \quad \gamma = 4,18.$$

$$\gamma^z = k_3/k_2 \quad z = (T_3 - T_2)/10 = 20/10 = 2. \quad \gamma^2 = 3428/255 = 13,44. \quad \gamma = 3,67.$$

$$\gamma_{\text{середнє}} = (4,40 + 4,18 + 3,67) / 3 = 4,08.$$

Середнє значення не потрапляє в інтервал 2 - 4, що говорить про те, що для розглянутої реакції правило Вант-Гоффа не виконується.