

Образец решения открытого задания 8
Теория к решению и пример находятся в лекциях 9 и 10

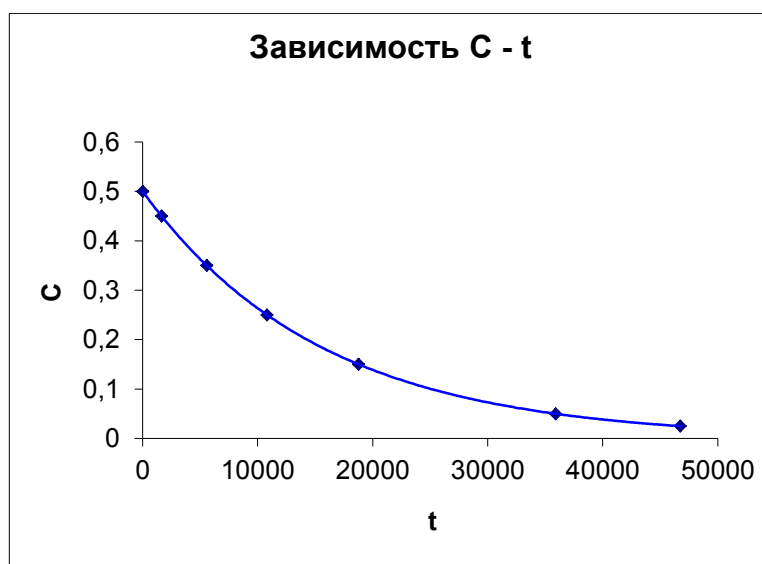
Расчёты проведём для следующих данных:

n	k ₀	T, К	E _a , КДж/моль	C ₀ , моль/л	Уменьшение E _a , %
1	3,2·10 ¹¹	760	228,4	0,5	2

- Расчёт константы скорости проведём по уравнению Аррениуса: $k = k_0 \exp(-E_a/RT) = 3,2 \cdot 10^{11} \exp(-228400/8,314 \cdot 760) = 6,41 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$. Не забудьте перевести энергию активации в Дж/моль.
- Данная реакция по условию относится к реакциям первого порядка (**n=1**). Внимательно изучите все кинетические закономерности для реакции первого порядка и выпишите необходимые формулы. Для реакции первого порядка это: $C=C_0 \exp(-kt)$ (1); $k=\ln(C_0/C)/t$ (2); $\tau_{1/2}=0,693/k$ (3). (Для реакций других порядков в лекции 9 следует найти другие формулы)

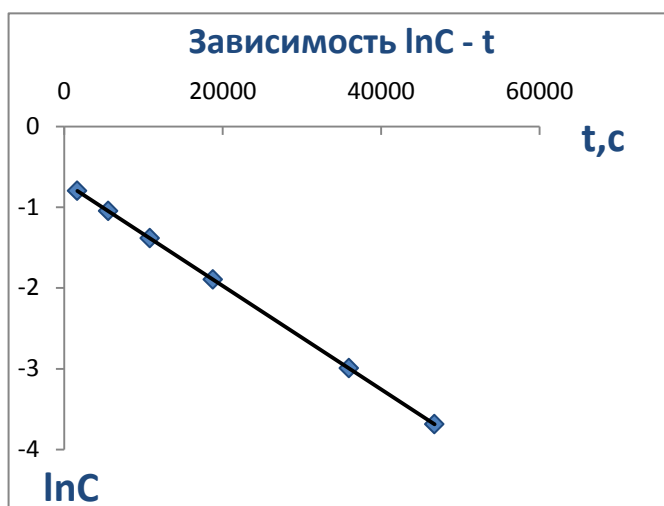
Далее следует **самому** выбрать шесть произвольных концентраций в интервале от 0 до C₀. При этом крайние точки должны отличаться не менее чем в 100 раз. Используя выбранные значения C по формуле 2 рассчитываем значения времени t, отвечающие каждой концентрации C. Данные такого расчёта удобно представить в виде таблицы Excel, по данным которой строим график C=f(t). При построении графика добавляем точку t=0, C=C₀.

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



- Расчёты времени полупревращения по графику выполняем следующим образом. Через точку C₀/2 на оси ординат проводим горизонталь до пересечения с кривой. Из точки пересечения опускаем перпендикуляр на ось времени до пересечения с ней. Это и есть время полупревращения. В нашем случае из графика $\tau_{1/2} \sim 11000 \text{ с}$. Расчёт по формуле (3) даёт $\tau_{1/2} = 10814 \text{ с}$.

4. Подтверждаем первый порядок реакции.
 а) Для этого строим график (в Excel) в координатах $\ln C-t$.



Видим, что все точки укладываются на прямую в выбранных координатах. Это подтверждает данный порядок реакции $n=1$.

- б) По формуле для константы скорости реакции первого порядка $k = \frac{1}{t} \ln C_0 / C$ рассчитываем шесть значений k для всех моментов времени.

C	t	ln C	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

Все шесть значений k одинаковы. Это подтверждает соответствие заданного порядка выбранной формуле.

5. Расчёт проводим с использованием уравнения Аррениуса. Записываем: $k_1 = k_0 \exp(-E_{a1}/RT)$ и $k_2 = k_0 \exp(-E_{a2}/RT)$. В нашем случае $E_{a2} = 0,98E_{a1}$ (энергия активации снижена на 2%) Находим отношение $k_2/k_1 = 2,06$. Это и есть ответ на вопрос п.4, т.е. при снижении энергии активации на 2% скорость реакции возрастёт в 2,06 раза.