

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

Исходные данные

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

Методические указания к решению

- 1 Для двух данных температур запишите уравнение Аррениуса и решите систему из двух уравнений. Рассчитайте E_a и k₀.

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

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

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

Делим первое уравнение на второе и получаем $k_1/k_2 = \exp[E_a/R(1/T_2 - 1/T_1)]$. Логарифмируем левую и правую части уравнения и получаем $\ln(k_1/k_2) = (E_a/R) \cdot (1/T_2 - 1/T_1)$. Подставляем известные величины и находим $E_a = 8,314 \cdot \ln(0,155/255) / (1/550 - 1/500) = 338636$ Дж. Записываем уравнение Аррениуса для T₁ и рассчитываем k₀.

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

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

- 2 Проверяя правило Вант-Гоффа, рассчитайте три значения температурного коэффициента, используя попарно значение k для трех температур. Вывод сделайте по среднему значению.

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

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

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

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

Среднее значение не попадает в интервал 2 - 4, что говорит о том, что для рассматриваемой реакции правило Вант-Гоффа не выполняется.