

7. Tepelný rozklad jistého uhlovodíku je reakcí prvního řádu. Při teplotě 500°C byl stanoven poločas reakce 4,3 s a aktivační energie byla 83,14 kJ.mol⁻¹. Určete teplotu, při které klesne poločas této reakce na 2 s.

$$k_1 = Ae^{-E_A/RT_1}$$

$$k_2 = Ae^{-E_A/RT_2}$$

$$\frac{\ln 2}{t_{1/2,1}} = Ae^{-E_A/RT_1}$$

$$\frac{\ln 2}{t_{1/2,2}} = Ae^{-E_A/RT_2}$$

$$\longleftarrow t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

$$\frac{\ln 2}{t_{1/2,1} \cdot e^{-E_A/RT_1}} = \frac{\ln 2}{t_{1/2,2} \cdot e^{-E_A/RT_2}} \longrightarrow t_{1/2,2} \cdot e^{-E_A/RT_2} = t_{1/2,1} \cdot e^{-E_A/RT_1}$$

$$\ln t_{1/2,2} - E_A/RT_2 = \ln t_{1/2,1} - E_A/RT_1$$

$$E_A/RT_1 - E_A/RT_2 = \ln t_{1/2,1} - \ln t_{1/2,2}$$

$$\frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) = \ln \frac{t_{1/2,1}}{t_{1/2,2}} \longrightarrow \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} = \frac{R}{E_A} \ln \frac{t_{1/2,1}}{t_{1/2,2}} \longrightarrow -\frac{1}{T_2} = \frac{R}{E_A} \ln \frac{t_{1/2,1}}{t_{1/2,2}} - \frac{1}{T_1}$$

$$T_2 = \frac{1}{\frac{1}{T_1} - \frac{R}{E_A} \ln \frac{t_{1/2,1}}{t_{1/2,2}}} = \frac{1}{\frac{1}{773,15} - \frac{8,314}{83140} \ln \frac{4,3}{2}} = 821,8K = 548,6^\circ C$$

DÚ. Rychlostní konstanta rozkladu 5-fluorouracilu je při 80°C $9,6 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ a aktivační energie této reakce je $102,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$. Jaká je rychlostní konstanta rozkladu při 60°C? (Předexponenciální faktor je na teplotě nezávislý.)

$$k_1 = Ae^{-E_A/RT_1}$$

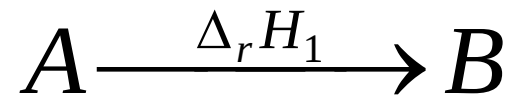
$$k_2 = Ae^{-E_A/RT_2}$$

$$\frac{k_1}{e^{-E_A/RT_1}} = \frac{k_2}{e^{-E_A/RT_2}}$$

$$\frac{k_2}{k_1} = \frac{e^{-E_A/RT_2}}{e^{-E_A/RT_1}} = e^{(-E_A/RT_2 + E_A/RT_1)} = e^{(E_A/R) \cdot (1/T_1 - 1/T_2)}$$

$$k_2 = 9,6 \cdot 10^{-7} \cdot e^{(102500/8,314) \cdot (1/353,15 - 1/333,15)} \text{ s}^{-1} = 1,18 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$$

9. cvičení **Termochemie**



$$\Delta_r H_1 = -\Delta_r H_2$$



$$\Delta_r H_4 = \Delta_r H_1 + \Delta_r H_3$$

9. cvičení **Termochemie**

Standardní slučovací teplo $\Delta_{sl}H^{\ominus}$

Standardní teplo reakce, při které vznikne jednotkové látkové množství sloučeniny z prvků v nejstálejší podobě

Standardní spalné teplo $\Delta_{sp}H^{\ominus}$

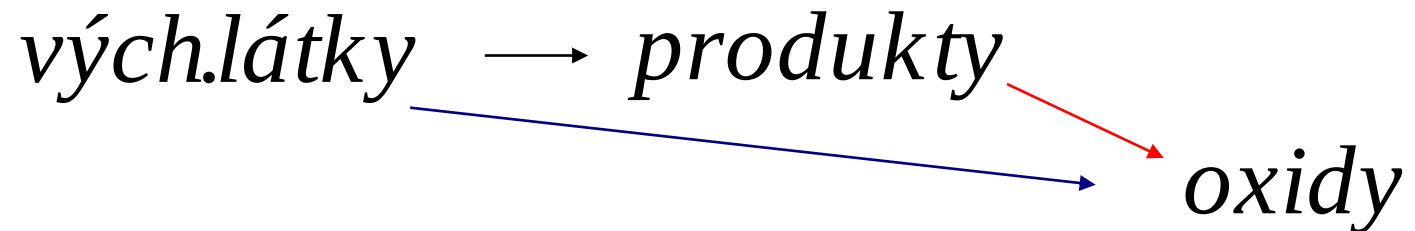
Standardní teplo reakce, při které se jednotkové látkové množství sloučeniny zoxiduje na konečné oxidační produkty

9. cvičení Termochemie

$$\Delta_r H^\ominus = \sum_{i=\text{produkty}} \nu_i \Delta_{sl} H_i^\ominus - \sum_{j=\text{vých.látky}} \nu_j \Delta_{sl} H_j^\ominus$$



$$\Delta_r H^\ominus = \sum_{j=\text{vých.látky}} \nu_j \Delta_{sp} H_j^\ominus - \sum_{i=\text{produkty}} \nu_i \Delta_{sp} H_i^\ominus$$



9. cvičení **Termochemie**

Molární tepelná kapacita za konstantního tlaku $C_{p,m}$

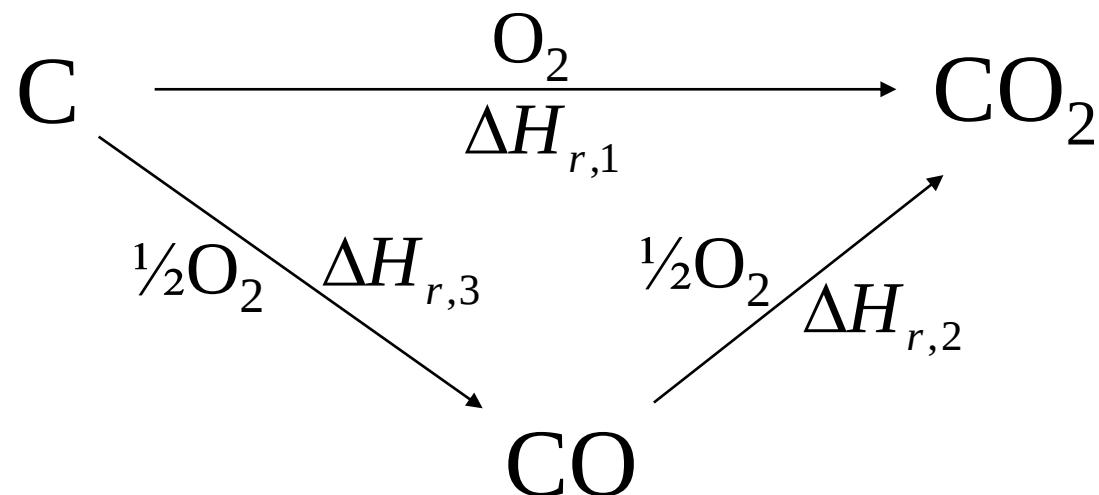
Množství tepla, které je třeba dodat, aby se jeden mol látky ohřál o 1 Kelvin

$$\Delta H = n c_{p,m} \Delta T$$

1. Pro izobaricky probíhající reakce byla při teplotě 25°C určena standardní reakční tepla následovně:



Jaké je reakční teplo reakce $\text{C (s)} + 0,5 \text{ O}_2 \text{ (g)} \rightarrow \text{CO (g)}$ provedené za stejných podmínek?



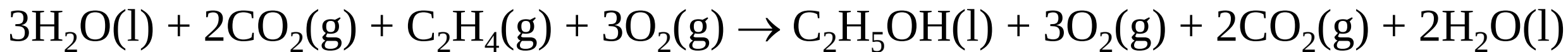
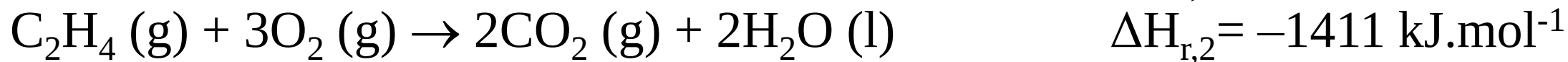
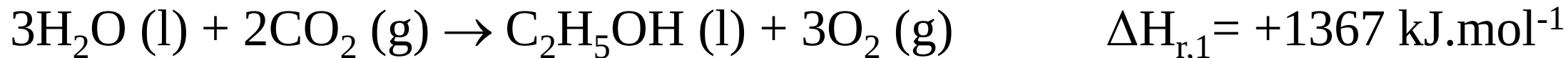
$$\Delta H_{r,3} = \Delta H_{r,1} - \Delta H_{r,2}$$

$$\Delta H_{r,3} = -393,1 - (-282,6) \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} = -110,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

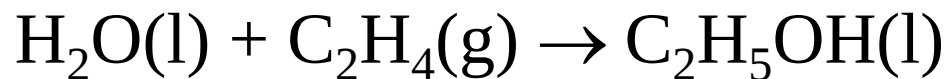
2. Pro izobaricky probíhající reakce byla při teplotě 25°C určena standardní reakční tepla následovně:



Jaké je reakční teplo reakce $\text{C}_2\text{H}_4 \text{ (g)} + \text{H}_2\text{O (l)} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{OH (l)}$ provedené za stejných podmínek?



$$\Delta H_{r,3} = +1367 - 1411 \text{ kJ.mol}^{-1}$$



$$\Delta H_{r,3} = -44 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

3. Vypočítejte standardní reakční teplo $\Delta_r H_{298}$ reakce $\text{CO (g)} + \text{H}_2\text{O (g)} \rightarrow \text{CO}_2 \text{(g)} + \text{H}_2 \text{(g)}$. Vypočítejte též reakční teplo této reakce při teplotě 500 K. K výpočtu použijte data v tabulce.

	$(\Delta H_{298})_{\text{sluč}} / \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$C_p / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
$\text{H}_2\text{O (g)}$	-241,82	33,58
CO (g)	-110,52	29,11
$\text{CO}_2 \text{(g)}$	-393,51	37,11
$\text{H}_2 \text{(g)}$	0,00	28,83

$$\Delta_r H_{298} = \sum_{i=\text{produkty}} \nu_i \Delta_{sl} H_i - \sum_{j=\text{vých.látky}} \nu_j \Delta_{sl} H_j$$

$$\Delta_r H_{298} = -393,51 + 0 - (-110,52 - 241,82) \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} = -41,17 \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

3. Vypočítejte standardní reakční teplo $\Delta_r H_{298}$ reakce $\text{CO (g)} + \text{H}_2\text{O (g)} \rightarrow \text{CO}_2 \text{(g)} + \text{H}_2 \text{(g)}$. Vypočítejte též reakční teplo této reakce při teplotě 500 K. K výpočtu použijte data v tabulce.

	$(\Delta H_{298})_{\text{sluč}} / \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$C_p / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
$\text{H}_2\text{O (g)}$	-241,82	33,58
CO (g)	-110,52	29,11
$\text{CO}_2 \text{(g)}$	-393,51	37,11
$\text{H}_2 \text{(g)}$	0,00	28,83



Ochlazení z 500K na 298K $\downarrow$

$\uparrow$ Ohřev z 298K na 500K



$$\Delta_r H_{500} = \sum_{j=\text{vých.látky}} c_{p,m,j} \Delta T + \Delta_r H_{298} + \sum_{i=\text{produkty}} c_{p,m,j} \Delta T$$

$$\Delta_r H_{500} = (29,11 + 33,58) \cdot (298 - 500) - 41170 + (37,11 + 28,83) \cdot (500 - 298) \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r H_{500} = -40514 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$