

Завдання 1

Для вказаної реакції (таблиця 1), користуючись довідковими даними (таблиця 2), вивести рівняння залежностей $\Delta H=f(T)$, $\Delta S=f(T)$, $\Delta G=f(T)$, $\ln K_p=f(T)$;

для температури T приблизно, вважаючи $C_p=\text{const}$, у діапазоні від $(T-200)$ до $(T+200)$ з інтервалом 100 обчислити:

а) ΔH , зробити висновок про тепловий ефект реакції, побудувати графік залежності $\Delta H=f(T)$;

б) ΔS , побудувати графік залежності $\Delta S=f(T)$;

в) ΔG , побудувати графік залежності $\Delta G=f(T)$, зробити висновок про напрямок мимовільного процесу;

для температури T визначити константу рівноваги K_p , користуючись виведеним рівнянням $\ln K_p=f(T)$;

визначити склад рівноважної суміші, вважаючи, що вихідні речовини взяті у стехіометричному співвідношенні;

вказати, як впливає температура і тиск на вихід продуктів реакції.

Завдання 2

Визначити коефіцієнт розподілення K и коефіцієнт n .

Завдання 3

У таблиці 3 наведені значення констант швидкості k_1 і k_2 реакції при двох різних температурах T_1 і T_2 . Обчисліть:

а) енергію активації реакції;

б) константу швидкості при температурі T_3 ;

в) кількість речовини, що прореагувала до моменту часу t , якщо початкова концентрація речовини C_0 моль/л, (початкові концентрації реагуючих речовин однакові); за який час прореагує 80% вихідної речовини; час напівперетворення вихідної речовини;

г) передекспоненційний множник у рівнянні Ареніуса.

Порядок реакції визначати по молекулярності.

№	Реакція	№	Реакція
1	$2\text{H}_2\text{O}(\text{r.}) = 2\text{H}_2 + \text{O}_2$	26	$\text{C}_2\text{H}_6(\text{r.}) + \text{CO} = \text{CH}_3\text{COCH}_3(\text{r.})$
2	$2\text{NH}_3 = \text{N}_2 + 3\text{H}_2$	27	$2\text{HI} = \text{H}_2 + \text{I}_2(\text{r.})$
3	$\text{COCl}_2(\text{r.}) = \text{CO} + \text{Cl}_2$	28	$\text{HI} + \text{CH}_3\text{I} = \text{CH}_4 + \text{I}_2(\text{u})$
4	$\text{SO}_2 + \text{Cl}_2 = \text{SO}_2\text{Cl}_2(\text{r.})$	29	$\text{CH}_3\text{OH}(\text{r.}) = 2\text{H}_2 + \text{CO}$
5	$\text{CO} + 3\text{H}_2 = \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}(\text{r.})$	30	$\text{N}_2\text{O}_4 = 2\text{NO}_2$
6	$2\text{H}_2\text{S} = 2\text{H}_2 + \text{S}_2(\text{r.})$	31	$\text{N}_2\text{O}_4 = 2\text{NO} + \text{O}_2$
7	$\text{C}_2\text{H}_4 = \text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_2$	32	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 = \text{H}_2\text{O}(\text{r.}) + \text{CO}$
8	$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_4$	33	$\text{CH}_3\text{COH}(\text{r.}) + \text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{r.})$
9	$\text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	34	$2\text{C}(\text{rp.}) + 2\text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_4$
10	$\text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_2 + 2\text{H}_2$	35	$2\text{NO}_2 = 2\text{NO} + \text{O}_2$
11	$2\text{CO} = 2\text{C}(\text{rp.}) + \text{O}_2$	36	$\text{NO} + 0,5\text{O}_2 = \text{NO}_2$
12	$2\text{C}(\text{rp.}) + \text{O}_2 = 2\text{CO}$	37	$2\text{SO}_3 = 2\text{SO}_2 + \text{O}_2$
13	$2\text{C}(\text{rp.}) + \text{O}_2 = 2\text{CO}$	38	$2\text{SO}_3 = 2\text{SO}_2 + \text{O}_2$
14	$2\text{CO}_2 = 2\text{CO} + \text{O}_2$	39	$\text{CS}_2(\text{r.}) = \text{C}(\text{rp.}) + \text{S}_2(\text{r.})$
15	$\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 = \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl}$	40	$\text{C}(\text{rp.}) + \text{S}_2(\text{r.}) = \text{CS}_2(\text{r.})$
16	$2\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{r.}) = (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}(\text{r.}) + \text{H}_2\text{O}$	41	$\text{CH}_4 = \text{C}(\text{граф.}) + 2\text{H}_2$
17	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{r.}) = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O}(\text{r.})$	42	$\text{C}(\text{граф.}) + 2\text{H}_2 = \text{CH}_4$
18	$\text{PCl}_5(\text{r.}) = \text{Cl}_2(\text{r.}) + \text{PCl}_3(\text{r.})$	43	$2\text{N}_2 + 6\text{H}_2\text{O} = 4\text{NH}_3 + 3\text{O}_2$
19	$\text{PCl}_3(\text{r.}) + \text{Cl}_2(\text{r.}) = \text{PCl}_5(\text{r.})$	44	$\text{CaO} + \text{CO}_2 = \text{CaCO}_3$
20	$\text{CH}_4 + \text{CO}_2 = \text{CH}_3\text{COOH}(\text{r.})$	45	$\text{MgO} + \text{CO}_2 = \text{MgCO}_3$
21	$\text{HCOOH}(\text{r.}) = \text{CO}_2 + \text{H}_2$	46	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 = \text{HCOOH}(\text{r.})$
22	$\text{HCOOH}(\text{r.}) = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}(\text{r.})$	47	$\text{Fe} - \alpha + \text{H}_2\text{O}(\text{r.}) = \text{FeO} + \text{H}_2$
23	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O}(\text{r.}) = \text{HCOOH}(\text{r.})$	48	$4\text{NO} + 6\text{H}_2\text{O} = 4\text{NH}_3 + 5\text{O}_2$
24	$2\text{C}(\text{граф.}) + \text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_2$	49	$4\text{HCl} + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}(\text{u}) + \text{Cl}_2$
25	$\text{C}_2\text{H}_6(\text{r.}) + \text{CO} = \text{CH}_3\text{COCH}_3(\text{r.})$		

Термодинамічні величини простих речовин та хімічних сполук

Речовина	ΔH_0 , кДж/моль	ΔS_0 , Дж/моль·К	C_p , Дж/моль·К	Коефіцієнти рівняння $C_p = a + bT + cT^2 + C'T^{-2}$, Дж/(кмоль·К)			
				a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^6$	$c' \cdot 10^{-5}$
C (графіт)	0	5,74	8,54	16,86	4,77		- 8,54
Cl ₂ (г)	0	222,98	33,93	37,03	0,67		-2,85
H ₂ (г)	0	130,52	28,83	27,28	3,26		0,5
I ₂ (г)	62,43	260,6	36,9	37,40	0,59		-0,71
N ₂	0	191,5	29,12	27,88	4,27		-
O ₂ (г)	0	205,04	29,37	31,46	3,39		-3,77
α Fe	0	27,15	24,98	17,24	24,77		0
FeO	-264,85	60,75	49,92	50,8	8,61		-3,31
S ₂ (г)	128,37	228,03	32,51	36,11	1,09		-3,51
CO(г)	-110,53	197,55	29,14	28,41	4,10		-0,46
CO ₂ (г)	-393,51	213,66	37,11	44,14	9,04		-8,54
COCl ₂ (г)	-219,5	283,64	57,76	67,15	12,03		-9,04
CS ₂ (г)	116,7	237,77	45,48	52,09	6,69		-7,53
CaCO ₃ (кр)	-1206,8	91,71	83,47	104,52	21,92		-25,94
CaO (кр)	-635,09	38,07	42,05	49,62	4,52		-6,95
HCl (г)	92,31	186,79	29,14	26,53	4,60		1,09
HI (г)	26,36	206,48	29,16	26,32	5,94		0,92
H ₂ O(г)	-241,81	188,72	33,61	30,00	10,71		0,33
H ₂ S (г)	-20,15	205,64	33,93	29,37	15,40		-
MgCO ₃ (кр)	-1095,85	65,1	76,11	77,91	57,74		-17,41
MgO (кр)	-601,49	27,07	37,2	48,98	3,14		-11,44
NH ₃	-45,94	192,66	35,16	29,8	25,48		-1,67
NO (г)	90,37	210,62	29,83	29,58	3,85		-0,59
NO ₂ (г)	34,19	240,06	36,66	41,16	11,33		-7,02
N ₂ O ₄ (г)	11,11	304,35	79,16	83,89	39,75		-14,9
PCl ₃ (г)	-287,02	311,71	71,84	80,11	3,1		-7,99
PCl ₅ (г)	-374,89	364,47	112,97	129,49	2,93		-16,4
SO ₂ (г)	-296,9	248,07	39,87	46,19	7,87		-7,7
SO ₂ Cl ₂ (г)	-363,17	311,29	77,4	87,91	16,15		-14,23
SO ₃ (г)	-395,85	256,69	50,09	64,98	11,75		-16,37
CH ₄ (г)	-74,85	186,27	35,71	14,32	74,66	-17,43	
C ₂ H ₂ (г)	226,75	200,82	43,93	26,44	66,65	-26,48	
C ₂ H ₄ (г)	52,3	219,45	43,56	11,32	122,01	-37,9	
C ₂ H ₆ (г)	-84,67	229,49	52,64	5,75	175,11	-57,85	
HCOOH (г)	-378,8	248,77	45,8	19,4	112,8	-47,5	
CH ₃ I (г)	13,97	254,01	44,14	19,67	92,67	-32,28	
CH ₃ OH (г)	- 201,0	239,76	44,13	15,28	105,2	-31,04	
CH ₃ COH (г)	- 166,0	264,2	54,64	13,0	153,5	- 53,7	
CH ₃ COOH (г)	-434,84	282,5	14,82	196,7	-77,7		
C ₂ H ₅ OH (г)	-234,8	281,38	65,75	10,99	204,7	-74,2	
CH ₃ COCH ₃ (г)	-217,57	294,93	74,9	22,47	201,8	-63,5	
CH ₃ Cl	-86,31	234,47	40,75	15,57	92,74	-28,31	
(C ₂ H ₅) ₂ O (г)	-252,21	342,67	112,51	21,09	341,7	-117,9	

Довідник:

http://web.kpi.kharkov.ua/fchem/wp-content/uploads/sites/30/2022/10/Therm_Tabl_U.pdf

1. Трихлороцтова кислота у CCl_4 (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,2780	0,6250	1,2337	3,1900	5,5290	7,3891
C_2 , моль/дм ³	0,0025	0,0088	0,0268	0,1353	0,3396	0,5770

2. Щавелева кислота у діетиловому ефірі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,4510	0,5488	0,6771	0,7788	0,8607	1,0513
C_2 , моль/дм ³	0,0455	0,0556	0,0686	0,0813	0,0907	0,1153

3. Оцтова кислота у бензолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,579	1,00	1,382	2,460	3,669	8,166
C_2 , моль/дм ³	0,016	0,035	0,055	0,135	0,256	0,905

4. Бензойна кислота у толуолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0057	0,0075	0,0096	0,0134	0,0183	0,0273
C_2 , моль/дм ³	0,0302	0,0498	0,0829	0,1620	0,3012	0,6703

5. Саліцилова кислота у бензолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,036	0,067	0,126	0,283	0,558	0,912
C_2 , моль/дм ³	0,018	0,051	0,146	0,533	1,65	4,34

6. Ізوماляна кислота у бензолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0078	0,0150	0,0365	0,0608	0,0907	0,1901
C_2 , моль/дм ³	0,0021	0,0067	0,0273	0,0672	0,1353	0,5016

7. Оцтова кислота у діетиловому ефірі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0132	0,0498	0,1340	0,2466	0,6065	1,2586
C_2 , моль/дм ³	0,0062	0,0224	0,0633	0,1225	0,3012	0,7408

8. Масляна кислота у аміловому спирті (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0155	0,0302	0,0743	0,1738	0,3679	0,6065
C_2 , моль/дм ³	0,0469	0,0907	0,2231	0,5169	1,1052	1,8221

9. Пікринова кислота у толуолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0226	0,0209	0,0183	0,0166	0,0132	0,0098
C_2 , моль/дм ³	0,0944	0,0821	0,0672	0,0550	0,0358	0,0198

10. Оцтова кислота у CCl_4 (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,6839	1,1052	1,6989	3,0042	4,9530	9,3933
C_2 , моль/дм ³	0,0094	0,0224	0,0498	0,1354	0,3329	1,0513

11. Бурштинова кислота у діетиловому ефірі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0016	0,0045	0,0138	0,0318	0,0608	0,1496
C_2 , моль/дм ³	0,0003	0,0009	0,0027	0,0067	0,0150	0,0408

12. Пікринова кислота у бензолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0334	0,0199	0,0101	0,0070	0,0033	0,0021
C_2 , моль/дм ³	0,1772	0,0700	0,0199	0,0101	0,0023	0,0009

13. Бензойна кислота у бензолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0041	0,0059	0,0088	0,0128	0,0185	0,028
C_2 , моль/дм ³	0,0213	0,0441	0,0940	0,1872	0,3970	0,795

14. Бурштинова кислота у аміловому спирті (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0268	0,0672	0,1827	0,4066	0,6703	1,1503
C_2 , моль/дм ³	0,0189	0,0498	0,1354	0,3012	0,4493	0,7118

15. Валеріанова кислота у бензолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0015	0,0020	0,0035	0,0075	0,0136	0,0265
C_2 , моль/дм ³	0,0016	0,0025	0,0055	0,0183	0,0498	0,1409

16. Пікринова кислота у хлороформі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0207	0,0302	0,049	0,059	0,082	0,135
C_2 , моль/дм ³	0,0254	0,0498	0,109	0,153	0,273	0,638

17. Мурашина кислота у хлороформі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	2,25	3,32	5,47	8,17	12,18	17,82
C_2 , моль/дм ³	0,017	0,041	0,111	0,223	0,497	1,131

18. Валеріанова кислота у толуолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0013	0,0020	0,0041	0,0071	0,0155	0,0290
C_2 , моль/дм ³	0,0008	0,0015	0,0050	0,0119	0,0455	0,1381

19. Бензойна кислота у хлороформі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0038	0,0041	0,0045	0,0050	0,0055	0,0063
C_2 , моль/дм ³	0,0354	0,0408	0,0474	0,0550	0,0639	0,0845

20. Оцтова кислота у хлороформі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,4066	0,5488	0,8607	1,1853	1,5841	2,0544
C_2 , моль/дм ³	0,0231	0,0369	0,0780	0,1353	0,2231	0,3499

21. Карболова кислота у хлороформі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0735	0,1108	0,1637	0,2466	0,3329	0,4361
C_2 , моль/дм ³	0,2019	0,4066	0,8187	1,6487	2,7183	4,4817

22. Пропіонова кислота у хлороформі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0330	0,0907	0,1999	0,4148	1,7860	5,1039
C_2 , моль/дм ³	0,0061	0,0273	0,1013	0,3362	3,3535	14,8797

23. Оцтова кислота у толуолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,9608	1,6487	2,7183	4,5722	8,7583	14,88
C_2 , моль/дм ³	0,0672	0,1225	0,2231	0,4148	0,9048	1,7507

24. Масляна кислота у бензолі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,0044	0,0136	0,0408	0,0907	0,2165	1,1275
C_2 , моль/дм ³	0,0011	0,0067	0,0388	0,1353	0,4916	6,6194

25. Лимонна кислота у діетиловому ефірі (C_2), у воді (C_1)

C_1 , моль/дм ³	0,2417	0,3012	0,4066	0,5488	0,6703	0,9139
C_2 , моль/дм ³	0,0016	0,0020	0,0027	0,0037	0,0045	0,0063

Вар .	Реакція	T_1, K	k_1	T_2, K	k_2	T_3, K	$t, xв$	$c_0, \text{кмоль/м}^3$
1	$H_2 + Br_2 \rightarrow 2HBr$	574,5	0,0856	497,2	0,00036	483,2	60	0,03
2	$H_2 + Br_2 \rightarrow 2HBr$	550,7	0,0159	524,6	0,0026	568,2	10	0,1
3	$H_2 + I_2 \rightarrow 2HI$	599,0	0,00146	679,0	0,0568	648,2	28	2,83
4	$H_2 + I_2 \rightarrow 2HI$	683,0	0,0659	716,0	0,375	693,2	27	1,83
5	$2HI \rightarrow H_2 + I_2$	456,2	$0,942 \cdot 10^{-6}$	700,0	0,00310	923,2	17	2,38
6	$2HI \rightarrow H_2 + I_2$	628,4	$0,809 \cdot 10^{-4}$	780,4	0,1059	976,2	18	1,87
7	$2NO \rightarrow N_2 + O_2$	1525,2	47059	1251,4	1073	1423,2	45	2,83
8	$2N_2O \rightarrow 2N_2 + O_2$	986,0	6,72	1165,0	977,0	1053,2	65	1,75
9	$N_2O_5 \rightarrow N_2O_2 + 1/2 O_2$	298,2	0,00203	288,2	$0,475 \cdot 10^{-3}$	388,2	32	0,93
10	$PH_3 \rightarrow 1/2 P_2 + 3/2 H_2$	953,2	0,0183	918,2	0,0038	988,2	80	0,87
11	$SO_2Cl_2 \rightarrow SO_2 + Cl_2$	522,2	$0,609 \cdot 10^{-4}$	593,2	$0,132 \cdot 10^{-2}$	688,2	35	2,5
12	$KClO_3 + 6FeSO_4 + 3H_2SO_4 \rightarrow 3Fe_2(SO_4)_3 + 3H_2O$	283,2	1,00	305,2	7,15	323,2	39	1,67
13	$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	288,2	0,00031	312,2	0,00815	303,2	89	3,85
14	$COCl_2 \rightarrow CO + Cl_2$	655,0	$0,53 \cdot 10^{-2}$	745,0	$67,7 \cdot 10^{-2}$	698,2	104,5	0,8
15	$(CH_2)_3 \rightarrow CH_3CH=CH_2$	833,2	0,00687	923,2	0,146	956,2	40	1,52
16	$C_2H_5ONa + CH_3 \rightarrow C_2H_5OCH_3 + Na$	273,2	0,0336	303,2	2,125	288,2	10	0,87
17	$CH_2(OH)CH_2Cl + KOH \rightarrow KCl + CH_2(OH)CH_2OH$	297,7	0,68	316,8	5,23	303,2	18	0,96
18	$CH_2ClCOOH + H_2O \rightarrow CH_2OHCOOH + HCl$	353,2	$0,222 \cdot 10^{-4}$	403,8	0,00237	423,2	26	0,50
19	$CH_3COOC_2H_5 + NaOH \rightarrow CH_3COONa + C_2H_5OH$	282,6	2,307	318,1	21,65	343,2	15	0,95
20	$CH_3COOCH_3 + H_2O \rightarrow CH_3COOH + CH_3OH$ (у водному розчині, каталізатор HCl 0,1 N)	298,2	$0,653 \cdot 10^{-3}$	308,2	$1,163 \cdot 10^{-3}$	313,2	25	1,60
21	$CH_3COOCH_3 + H_2O \rightarrow CH_3COOH + CH_3OH$ (у водному розчині, каталізатор HCl 1,8 N)	298,2	$16,09 \cdot 10^{-5}$	308,2	$37,84 \cdot 10^{-5}$	323,2	80	2,96
22	$CH_3COOC_2H_5 + H_2O \rightarrow CH_3COOH + C_2H_5OH$ (у водному розчині, каталізатор HCl 0,1N)	273,2	$2,056 \cdot 10^{-3}$	312,2	109,41	298,2	67	3,55
23	$2CH_2O + NaOH \rightarrow HCOONa + CH_3OH$	323,2	$5,51 \cdot 10^{-3}$	358,2	$294,01 \cdot 10^{-3}$	338,2	5	0,5
24	$(CH_3)_2SO_4 + NaI \rightarrow CH_3I + Na(CH_3)SO_4$	273,2	0,029	298,1	1,04	285,8	100	3,89
25	$C_6H_5CH_2Br + C_2H_5OH \rightarrow C_6H_5CH_2OC_2H_5 + HBr$	298,2	1,44	388,2	2,01	318,2	90	2,67
26	$C_{12}H_{22}O_{11} + H_2O \rightarrow C_6H_{12}O_6 + C_6H_{12}O_6$	298,2	0,765	328,2	35,5	323,6	15	1,85