**Самостоятельная работа № 2**

**«Химическая термодинамика. Кинетика»**

**Задача 1 (таблица 1).**

**1.** Для заданного процесса (см. свой вариант) выпишите термодинамические характеристики веществ (табличные данные при 298 К), рассчитайте ∆r*Н*0298, ∆r*S*0298, ∆r*G*0298 (∆r*G*0298 - двумя способами) и сделайте вывод о возможности самопроизвольного протекания процесса при стандартных состояниях веществ и температуре 298 К.

2. Определите область температур, в которой возможно самопроизвольное протекание процесса при стандартных состояниях веществ и постройте график зависимости ∆r*G*0Т(T) (считая, что ∆r*Н*0 и ∆r*S*0 не зависят от температуры).

3. Для состояния, отличного от стандартного, рассчитайте r*G*298, если начальные относительные парциальные давления газообразных компонентов в реакционной смеси равны: =102 – для исходных веществ и = 10-2 – для продуктов. Сравните полученный результат c ∆r*G*0298 при стандартных состояниях веществ. Сделайте вывод о смещении равновесия при повышении парциального давления исходных веществ и понижении парциального давления продуктов реакции.

4. Для любой температуры, взятой из найденной области температур в п.2 (∆r*G*0Т˂0), рассчитайте значение *КР* (*R*=8,31 Дж/моль·К) и *Кс* (*R*=0,082 л·атм/моль·К), а также равновесные концентрации всех газообразных веществ (начальные концентрации исходных веществ приведены в Таблице 1, начальные концентрации продуктов реакции равны 0 моль/л).

**5.** Рассчитайте ***КР*** и ***Кс*** при Т на Т градусов ниже (Т1) и выше (Т2) выбранной в п.4. Объясните полученную зависимость ***КР*** = ***f*** (T). Предложите условия, при которых выход продуктов будет увеличиваться.

**Задача 2 (таблица 2).**

**1**. Что называется молекулярностью и порядком реакции? Совпадают ли они в Вашем примере (см. значение n своего варианта)? В чем может быть причина несовпадения молекулярности и порядка реакции? Напишите основное кинетическое уравнение для Вашей реакции (см. свой вариант).

**2.** Каков физический смысл константы скорости реакции? Определите константы скорости реакции при Т1 и Т2, если предэкспоненциальный множитель равен A0, а энергия активации ***ЕА***. От каких параметров и как зависит константа скорости реакции? Укажите ее размерность для Вашей реакции.

**3.** Что называется периодом полупревращения? Как зависит он от начальной концентрации для Вашей реакции? Рассчитайте время, необходимое для того, чтобы прореагировало …% исходной концентрации, если порядок реакции n=…, а исходные концентрации равны …. (см. таблицу 2)

**4.** Постройте график зависимости концентрации реагирующих веществ и продуктов реакции от времени для Т1 и Т2. Сделайте вывод о влиянии температуры на характер этих зависимостей. Каким образом можно повлиять на температурную зависимость скорости реакции?

**Задача №1**

**Таблица 1**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Вар.** | **Химическая реакция** | **Начальные концентрации, моль/л** | **∆T, K** |
| 1 | H2(г) + Cl2(г) 2HCl(г) | СH2 = СCl2 = 2 | 100 |
| 2 | C(т) + CO2(г) 2CO(г) | СCO2 = 1, cколько граммов С прореагирует? | 100 |
| 3 | N2(г) + O2(г) 2NO(г) | СN2  = СO2 = 1 | 50 |
| 4 | C2H4(г) + Cl2(г) C2H4Cl2(г) | СC2H4 = СCl2 = 2 | 80 |
| 5 | Fe(т) + SO2(г)  FeO(т) + SO(г) | СSO2 = 2, cколько граммов Feпрореагирует? | 100 |
| 6 | FeO(т) + SO2(г) Fe(т) + SO3(г) | СSO2 = 1, cколько граммов FeОпрореагирует? | 50 |
| 7 | 2NH3(г) N2(г) + 3H2(г) | СNH3 = 1 | 100 |
| 8 | 2NO2(г) N2O4(г) | СNO2 = 1 | 70 |
| 9 | C2H4(г) + HBr(г) C2H5Br(г) | СC2H4 = 2; СHBr = 1 | 50 |
| 10 | CO(г) + H2O(г) CO2(г) + H2(г) | СCO = 3; СH2O = 4 | 100 |
| 11 | H2(г) + S(т) H2S(г) | СH2 = 1; , cколько граммов Sпрореагирует? | 100 |
| 12 | N2O4(г) 2NO2(г) | СN2O4 = 2 | 50 |
| 13 | H2(г) + I2(г) 2HI(г) | СH2 = СI2 = 1 | 100 |
| 14 | Fe(т) + H2O(г) FeO(т) + H2(г) | СH2O = 1, cколько граммов Feпрореагирует? | 100 |
| 15 | CОCl2(г) CO(г) + Cl2(г) | СCOCl2 = 2 | 100 |
| 16 | PCl3(г) + Cl2(г) PCl5(г) | СPCl3 = 2; СCl2 = 1 | 50 |
| 17 | Fe(т) + CO2(г) FeO(т) + CO(г) | СCO2 = 2, cколько граммов Feпрореагирует? | 100 |
| 18 | CH4(г) + H2O(г)  CO(г) + 3H2(г) | СCH4 = 2; СH2O = 10 | 80 |
| 19 | 2SO2(г) + O2(г) 2SO3(г) | СSO2 = 1; СO2 = 0,6 | 100 |
| 20 | N2(г) + O2(г) 2NO(г) | Начальные концентрации азота и кислорода соответствуют их содержанию в воздухе | 50 |
| 21 | CO(г) + Cl2(г) COCl2(г) | СCO = 2; СCl2 = 1 | 80 |
| 22 | Sb2S3(т)+3H2(г) 2Sb(т) + 3H2S(г) | СH2=1, cколько граммов Sb2S3 прореагирует? | 50 |
| 23 | FeO(т) + CO(г) Fe(т) + CO2(г) | CСO = 2, cколько граммов FeОпрореагирует? | 50 |
| 24 | H2(г) + Br2(г) 2HBr(г) | СH 2= 2; CBr2 = 1 | 80 |
| 25 | SO2(г) + NO2(г) SO3(г) + NO(г) | СSO2 = 2; СNO2 = 1 | 100 |
| 26 | C2H4(г) + HCl(г) C2H5Cl(г) | СC2H4=2; СHCl = 1 | 100 |
| 27 | SO2(г) + Cl2(г) SO2Cl2(г) | cSO2=1; cCl2=2; cSO2Cl2=0 | 80 |
| 28 | 2Sb(т)+ 3H2S(г) Sb2S3(т) +3H2(г) | CH2S = 2, cколько граммов Sb прореагирует? | 70 |
| 29 | C2H4(г) + H2(г) C2H6(г) | CC2H4 = 1; CH2 = 2 | 30 |
| 30 | N2(г) + 3H2(г) 2NH3(г) | CN2 = 5; CH2=1 | 50 |

**Задача №2**

**Таблица 2**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Вар. | Реакция | n | A0 | Ea, кДж/  моль | Т1, K | Т2,  K | % | Исх. конц. моль/л |
| 1 | 2NO2→2NO+O2 | 2 | 9,4·1012 | 112,6 | 200 | 300 | 60 | 2 |
| 2 | H2+C2H4→C2H6 | 2 | 4·1013 | 180 | 200 | 500 | 60 | 2 |
| 3 | N2O4→2NO2 | 1 | 1016 | 54,4 | 400 | 500 | 40 | 2 |
| 4 | HI+CH3I→CH4+I2 | 2 | 2·1014 | 140 | 400 | 700 | 70 | 2 |
| 5 | 2N2O5→2N2O4+O2 | 1 | 4,6·1013 | 103,5 | 400 | 600 | 60 | 1 |
| 6 | CH3+\*CH4→CH4+\*CH3 | 2 | 3,2·1011 | 59,8 | 600 | 800 | 80 | 1 |
| 7 | C2H5Cl→C2H4+HCl | 1 | 4·104 | 247,5 | 400 | 500 | 50 | 2 |
| 8 | D2+HCl→HD+DCl | 2 | 3,2·1015 | 222,4 | 700 | 850 | 50 | 2 |
| 9 | H2+ClI→HI+HCl | 2 | 1,6·1015 | 41,8 | 500 | 650 | 70 | 1 |
| 10 | C2H5Br→C2H4+HBr | 1 | 7,2·1012 | 218 | 300 | 400 | 60 | 2 |
| 11 | OH\*+H2→H2O+H\* | 2 | 1,6·1015 | 41,8 | 900 | 1200 | 50 | 1 |
| 12 | C6H5CH2ONa+C4H9I→  C6H5CH2OC4H9+NaI | 2 | 2,9·1011 | 90,1 | 300 | 450 | 40 | 1 |
| 13 | H2+BrCl→HBr+HCl | 2 | 2·1014 | 50 | 300 | 400 | 40 | 1 |
| 14 | NO\*+Br2→NOBr+Br\* | 2 | 4·1012 | 95 | 200 | 350 | 70 | 2 |
| 15 | (C2H5)3N+C2H5Br→(C2H5)4NBr | 2 | 2,8·102 | 46,8 | 300 | 450 | 60 | 1 |
| 16 | 2N2O5→2N2O4+O2 | 1 | 4,6·1013 | 103,5 | 300 | 500 | 50 | 3 |
| 17 | HI+CH3I→C2H6+I2 | 2 | 5,0·1013 | 124 | 250 | 400 | 30 | 2 |
| 18 | C6H5ONa+C3H7I→C6H5OC3H7+NaI | 2 | 3,5·1011 | 93,6 | 300 | 500 | 50 | 2 |
| 19 | HI+CH3I→CH4+I2 | 2 | 2·1014 | 140 | 300 | 600 | 60 | 1 |
| 20 | 2N2O5→2N2O4 +O2 | 1 | 4,6·1013 | 103,5 | 200 | 700 | 80 | 2 |
| 21 | 2O3→3O2 | 2 | 6,3·1018 | 117,9 | 300 | 500 | 70 | 1 |
| 22 | (CH3CO)2O+C2H5OH→  CH3COOC2H5+CH3COOH | 2 | 4,1·105 | 56,0 | 300 | 500 | 30 | 1 |
| 23 | C2H5ONa+CH3I→C2H5OCH3+NaI | 2 | 2,4·1011 | 81,5 | 300 | 450 | 40 | 2 |
| 24 | H2+I2→2HI | 2 | 1,6·1014 | 165,5 | 400 | 600 | 60 | 1 |
| 25 | 2HI→ H2+I2 | 2 | 9,2·1013 | 186,4 | 500 | 300 | 80 | 1 |
| 26 | C2H5Cl→C2H4+HCl | 1 | 4·104 | 248 | 300 | 500 | 80 | 2 |
| 27 | H2+C2H4→C2H6 | 2 | 4·1013 | 180 | 300 | 600 | 50 | 1 |
| 28 | 2NO2→2NO+O2 | 2 | 9,4·1012 | 112,6 | 400 | 600 | 50 | 1 |
| 29 | C2H5Br→C2H4+HBr | 1 | 7,2·1012 | 218 | 300 | 400 | 50 | 1 |
| 30 | CO2+OH-→HCO3- | 2 | 1,5·1013 | 38,2 | 300 | 350 | 60 | 1 |