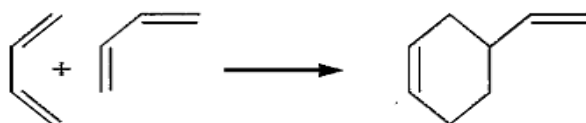


Άσκηση για μελέτη του νόμου ταχύτητας μιας αντίδρασης 2^{ης} τάξεως

Το βουταδιένιο, C_4H_6 , διμερίζεται μέσω μιας συμπύκνωσης Diels–Alder, σχηματίζοντας ένα υποκατεστημένο κυκλοεξένιο, C_8H_{12} . Με βάση τα δεδομένα της αέριας αντίδρασης στους 400 K που δίνονται παρακάτω, να αποδειχθεί ότι ο διμερισμός πραγματοποιείται ως αντίδραση δευτέρης τάξεως και να υπολογιστεί η σταθερά ταχύτητας.



Δίδονται οι κάτωθι χρόνοι και ολικές πιέσεις:

Χρόνος (s)	Ρολ (torr)
0	626
750	579
1500	545
2460	510
3425	485
4280	465
5140	450
6000	440
7500	425
9000	410
10500	405

Λύση

Η άσκηση ζητά να αποδείξετε ότι η αντίδραση διμερισμού του βουταδιενίου είναι **δευτέρης τάξεως** και να υπολογίσετε τη σταθερά ταχύτητας k , χρησιμοποιώντας δεδομένα ολικής πίεσης σε θερμοκρασία 400K.

Η αντίδραση είναι: $2C_4H_6 \rightarrow C_8H_{12}$

Έστω P_0 η αρχική πίεση του βουταδιενίου ($t = 0$). Αν μετά από χρόνο t έχει αντιδράσει ποσότητα βουταδιενίου που αντιστοιχεί σε πίεση $2x$, τότε σύμφωνα με τη στοιχειομετρία:

- Πίεση βουταδιενίου: $P(C_4H_6) = P_0 - 2x$
- Πίεση προϊόντος: $P(C_8H_{12}) = x$

Η ολική πίεση ($P_{ολ}$) είναι το άθροισμα των μερικών πιέσεων: $P_{ολ} = (P_0 - 2x) + x = P_0 - x$

Από τη σχέση αυτή προκύπτει ότι $x = P_0 - P_{ολ}$. Αντικαθιστώντας το x στην έκφραση για την πίεση του αντιδρώντος ($P_{αντ.}$), έχουμε:

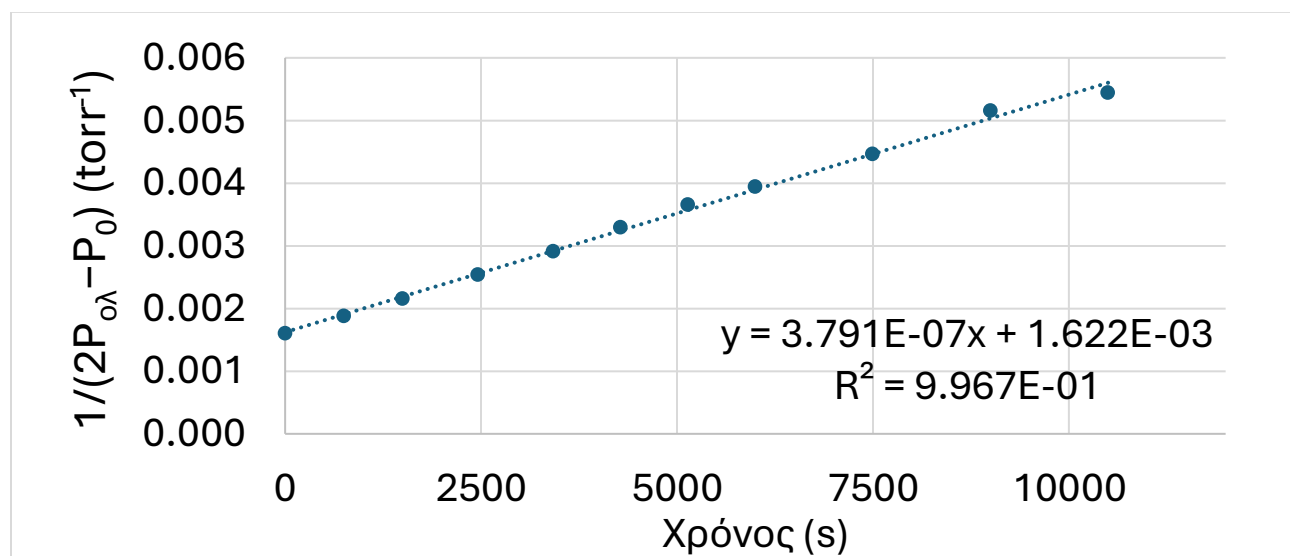
$$P(C_4H_6) = P_0 - 2x = P_0 - 2(P_0 - P_{ολ}) = 2P_{ολ} - P_0$$

Για μια αντίδραση δεύτερης τάξεως ως προς το αντιδρών A, η ολοκληρωμένη μορφή του νόμου ταχύτητας είναι: $1/P_A = 1/P_{A,0} + kt$

P_A : η μερική πίεση του αντιδρώντος τη χρονική στιγμή t , k : η σταθερά ταχύτητας.

Χρόνος (s)	$P_{ολ}$ (torr)	$2P_{ολ}-P_0$	$1/(2P_{ολ}-P_0)$
0	626	626	0.0016
750	579	532	0.0019
1500	545	464	0.0022
2460	510	394	0.0025
3425	485	344	0.0029
4280	465	304	0.0033
5140	450	274	0.0036
6000	440	254	0.0039
7500	425	224	0.0045
9000	410	194	0.0052
10500	405	184	0.0054

Επομένως, αν η γραφική παράσταση του $1/P(C_4H_6)$ σε συνάρτηση με το χρόνο (t) είναι ευθεία γραμμή, η αντίδραση είναι πράγματι δεύτερης τάξεως.



Η σταθερά ταχύτητας είναι $k = 3.791 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1} \text{ torr}^{-1}$. Για μετατροπή μονάδων, είναι $k = 3.791 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1} \text{ torr}^{-1} \times (760 \text{ torr/1 atm}) \times (82.06 \text{ cm}^3 \text{ atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times (400\text{K}) = 9.46 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$.