1.Koristeći metode statističke termodinamike izračunajte standardnu reakcijsku entalpiju i entropiju za reakciju:

H2(g) + D2(g)  2HD(g)

pri 298,15 K.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | H2 | D2 | HD |
| *r*e / pm | 74,14 | 74,17 | 74,13 |
| *ω*e**/ cm–1 | 4405 | 3119 | 3817 |
| *D*0 / eV | 4,4763 | 4,5536 | 4,5112 |

2. Izračunajte standardnu reakcijsku Gibbsovu energiju za reakciju:

H2(g) + Cl2(g) → 2HCl(g)

pri 400 K koristeći sljedeće podatke: Δf*G*(HCl(g), 298, 15 K) = 95,30 kJ mol1; **r (H2)/ K =87,53; *ωe*(H2)**/ cm–1 = 4401 ; **r (Cl2)/ K = 0,345; *ωe*(Cl2)**/ cm–1 = 559,7 ; **r (HCl)/ K =15,24; *ωe*(HCl)**/ cm–1 = 2990.

3. Izračunajte koncentracijsku konstantu ravnoteže (*Kc*) za reakciju:

I2(g)  2I(g)

pri 1000 K. (*D*e(I2) = 1,5422 kJ mol1; *ω*e= 214,36 cm1; *B* = 0,0373 cm1. Osnovno elektronsko stanje atoma joda je četverostruko degenerirano.

4. Izračunajte standardnu konstantu ravnoteže ionizacije atoma vodika prema jednadžbi:

H(g)  H+(g) + e(g)

pri 5000 K. Valna duljina Hα linije u Lymannovoj seriji iznosi 1216 Å. Pretpostavite da pri danoj temperaturi za elektrone vrijedi Maxwell-Boltzmannova statistika.

5. Odredite standardnu konstantu ravnoteže za reakciju:

2H2(g) + O2(g)  2H2O(g)

pri 1000 K.

(*D*e(H2O) = 917,6 kJ mol1, *D*e(H2) = 431,8 kJ mol1; *D*e(O2) = 493,7 kJ mol1)

6. Pokažite da je pri visokim temperaturama iznos standardne konstante ravnoteže za reakciju izotopne izmjene:

14N2(g) + 15N2(g)  214N15N(g).

približno jednak 4. Pretpostavite da su energije disocijacije

svih molekula jednake. (*ω*e(14N2)=2358,57 cm1; B(14N2) = 1,998 cm1)

7.Izračunajte konstantu ravnoteže *Kc* pri 1000 K za reakciju

H2 + D2  2 HD

Zadani su podatci:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | H2 | D2 | HD |
| *r*e / pm | 74,14 | 74,17 | 74,13 |
| *ω*/ cm–1 | 4405 | 3119 | 3817 |
| *E*d,0 / eV | 4,4763 | 4,5536 | 4,5112 |

8. Iz eksperimentalno određenih reakcijskih entalpija i te izračunatih molarnih entropija i toplinskih kapaciteta reaktanata i produkata odredite standardnu konstantu ravnoteže za reakciju:

2H2(g) + 2C(g)  H2C2(g)

pri 400 K:

C(s) → C(g); Δr*H*(298 K) =  717 kJ mol1

Δ*fH*( H2C2(g), 298 K) =  kJ mol1

H2

re(H2) / pm = 74,14

*ω*e(H2)/ cm–1 = 4405

H2C2

*r*C-H(H2C2) / pm = 106,1 pm

*r*C-C(H2C2) / pm = 120,7 pm

**1(CH) = 3374 cm–1; **2(CC) = 1974 cm–1; **3(CH) = 3289 cm–1; **4(CCH) = 612 cm–1; **5(CCH) = 730 cm–1.

