

La costante cinetica relativa alla decomposizione di una certa sostanza è $2.80 \times 10^{-3} \text{ L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ a 30°C e $1.38 \times 10^{-2} \text{ L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ a 50°C , secondo la reazione $A \longrightarrow$ prodotti.

Calcolare l'energia di attivazione e il fattore preesponenziale a 30°C . Sempre a 30°C , qual è il tempo di semitrasformazione, $t_{1/2}$, se la concentrazione di partenza della sostanza era 0.6 mol L^{-1} ?

Risoluzione

Dall'equazione di Arrhenius:

$$\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right) = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

si ottiene:

$$E_a = \frac{R T_1 T_2 \ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right)}{T_2 - T_1}$$

$$E_a = \frac{8.31447 \text{ (J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}) \times 303.15 \text{ (K)} \times 323.15 \text{ (K)} \times \ln\left(\frac{1.38 \times 10^{-2}}{2.80 \times 10^{-3}}\right)}{323.15 \text{ (K)} - 303.15 \text{ (K)}}$$

$$E_a = \mathbf{64959.16 \text{ J mol}^{-1}}$$

Con il seguente fattore preesponenziale:

$$A = k_1 \cdot \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right)$$

$$A = 2.80 \times 10^{-3} (\text{L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}) \times \exp\left(\frac{64959.16 (\text{J mol}^{-1})}{8.31447 (\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}) \times 303.15 \text{ (K)}}\right)$$

$$A = \mathbf{4.36314 \times 10^8 \text{ L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}}$$

Dalle dimensioni delle costanti cinetiche si deduce che la reazione segue una cinetica del secondo ordine, pertanto il tempo di semitrasformazione sarà:

$$t_{1/2} = \frac{1}{[A_0] k_1} = \frac{1}{0.6 (\text{mol L}^{-1}) \times 2.80 \times 10^{-3} (\text{L mol}^{-1} \text{ s}^{-1})} = \mathbf{595.24 \text{ s}}$$

oppure **9 min e 55 s**.