

5 a) KONDUKTOMETRIE – KONDUKTOMETRICKÉ STANOVENÍ DISOCIAČNÍ KONSTANTY SLABÉHO ELEKTROLYTU

Roztoky elektrolytů jsou schopny vést elektrický proud. Vodivost je u nich dána pohybem kladných a záporných iontů, které vznikají disociací elektrolytu.

Měření vodivosti roztoku lze nejpřesněji uskutečnit metodou využívající zapojení typu Wheatstoneova můstku se zdrojem střídavého napětí o vyšší frekvenci (při použití stejnosměrného napětí by docházelo k rozkladu elektrolytu vlivem elektrolýzy). V současné době užívané přístroje jsou typu výchylkových konduktometrů, u nichž se přímo odečítá vodivost v příslušných jednotkách. Podle Ohmova zákona je velikost střídavého proudu protékajícího mezi elektrodami přímo úměrná vodivosti roztoku, kterým je nádobka naplněna. U výchylkové metody se velikost proudu, tedy i vodivost zjišťuje nepřímou z úbytku napětí na odporu zařazeném v sérii s odporem měřeného roztoku v konduktometrické nádobce.

Vodivost roztoku se měří za pomoci vodivostní cely. Vodivostní cely obsahuje platinové elektrody, jejichž prostřednictvím prochází měřeným roztokem elektrický proud. Odpor elektrolytu je přímo úměrný vzdálenosti těchto elektrod l (délce vodiče) a nepřímou úměrnou jejich ploše S (průřezu vodiče):

$$R = \rho \cdot \frac{l}{S} \quad (\text{V-1}),$$

$$G = \kappa \cdot \frac{S}{l} \quad (\text{V-2}),$$

kde R je odpor a jeho převrácená hodnota pak vodivost G , měřená v jednotkách Ω^{-1} nebo též S (siemens). Konstanta úměrnosti ρ ve vztahu (V-1) je rezistivita ($\Omega \cdot \text{m}$), dříve nazývaná měrný odpor, a charakterizuje materiál, z něhož je vodič (elektrolyt) zhotoven. Převrácená hodnota rezistivity je konduktivita κ , dříve měrná vodivost, měřená v jednotkách $\text{S} \cdot \text{m}^{-1}$. Veličina l/S se označuje C a nazývá odporová konstanta vodivostní cely. Vodivost rovnou přímo konduktivitě by měl vodič tvaru krychle o hraně jednotkové délky.

Měřený roztok se umístí do nádoby, v níž jsou upevněny platinové elektrody (vodivostní cely), které jsou pokryty platinovou černí, aby se zabránilo jejich polarizaci. Nádobka s roztokem se zapojí ke konduktometru a odečte se hodnota vodivosti. Pro výpočet konduktivity κ je třeba vodivostní cely nakalibrovat, tzn. určit hodnotu její odporové konstanty. Kalibrace se provede tak, že se nádobka naplní vhodným standardem, jehož konduktivita κ_s je známa, a změří se

vodivost G_s . Na základě vztahu $\kappa_s/G_s = C$ se vypočítá odporová konstanta nádoby. Jako standardu se nejčastěji užívá různě koncentrovaných roztoků KCl (viz Tabulka V-1).

Tabulka V-1: Konduktivity κ_s [$\text{mS}\cdot\text{cm}^{-1}$] pro roztoky 0,01 a 0,1 $\text{mol}\cdot\text{dm}^{-3}$ KCl při různých teplotách

$t / ^\circ\text{C}$	18	19	20	21	22	23	24	25
0,01M-KCl	1,225	1,251	1,278	1,305	1,332	1,359	1,386	1,413
0,1M-KCl	11,19	11,43	11,67	11,91	12,15	12,39	12,64	12,88

Tzv. molární vodivost Λ [$\text{S}\cdot\text{m}^2\cdot\text{mol}^{-1}$] je definována jako poměr konduktivity κ [$\text{S}\cdot\text{m}^{-1}$] a molární koncentrace c [$\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$] měřeného roztoku

$$\Lambda = \frac{\kappa}{c} \quad (\text{V-3})$$

Při vysokých koncentracích elektrolytu v roztoku dochází vlivem elektrostatických přitažlivých sil ke vzniku iontových párů, které jsou navenek elektroneutrální, a tudíž nepřispívají k vodivosti roztoku – molární vodivost roztoku klesá, což je u slabých elektrolytů umocněno poklesem stupně disociace s růstem jejich koncentrace v roztoku. Se zředováním roztoku se elektrostatické interakce snižují a klesá počet iontových párů, molární vodivost roztoku roste. U slabých elektrolytů navíc se zředováním roztoku roste disociační stupeň, což rovněž přispívá k růstu molární vodivosti roztoku. Maximální hodnotu pak molární vodivost dosahuje při tzv. mezním (nekonečném) zředění (koncentrace elektrolytu v roztoku se velmi blíží nule), přičemž tato maximální hodnota se nazývá molární vodivost při nekonečném zředění Λ_∞ . Molární vodivost Λ tedy není charakteristickou konstantou pro daný elektrolyt, tou je teprve její limitní hodnota při mezním zředění Λ_∞ .

Disociační konstantu slabých kyselin (jednosytných) je možno stanovit na základě vztahu mezi disociačním stupněm a molární vodivostí roztoku slabého elektrolytu:

$$\alpha = \frac{\Lambda}{\Lambda_\infty} \quad (\text{V-4}).$$

Pro disociační konstantu platí vztah

$$K_A = \frac{c_{\text{H}_3\text{O}^+} \cdot c_{\text{A}^-}}{c_{\text{HA}}} \cdot \frac{\gamma_{\text{H}_3\text{O}^+} \cdot \gamma_{\text{A}^-}}{\gamma_{\text{HA}}} \quad (\text{V-5}).$$

Aktivní koeficient nedisociované kyseliny γ_{HA} lze brát přibližně roven jedné (zředěný roztok), takže člen s aktivními koeficienty se zjednoduší na výraz

$$K_{\gamma} = \gamma_{+} \cdot \gamma_{-} = \gamma_{\pm}^2 \quad (\text{V-6}).$$

Střední aktivní koeficient vypočítáme z Debyeova-Hückelova limitního vztahu

$$\log \gamma_{\pm} = -A |z_{+} \cdot z_{-}| \sqrt{I} \quad (\text{V-7}),$$

kde konstanta A je pro vodu a 25 °C rovna $0,5093 \text{ mol}^{-1/2} \cdot \text{dm}^{3/2}$. Iontová síla I je dána pro jednosytnou slabou kyselinu vztahem:

$$I = \alpha \cdot c \quad (\text{V-8}).$$

Po uvážení všech výše uvedených vztahů lze určit hodnotu disociační konstanty z vodivostních měření podle rovnice:

$$K_{\text{A}} = \frac{c \cdot \Lambda^2}{\Lambda_{\infty} \cdot (\Lambda_{\infty} - \Lambda)} \cdot K_{\gamma} \quad (\text{V-9}).$$

Síla kyselin závisí na chemické konstituci molekuly. Zvýšení ionizovatelnosti $-\text{COOH}$ skupiny v kyselině octové při substituci chlorem v poloze α spočívá v induktivním posunu elektronů směrem k atomu chloru. Zvýšená ionizace α -substituované kyseliny se projeví zřetelně v rozdílných hodnotách disociační konstanty kyseliny octové a kyseliny monochloroaceticové.

Poznámka: Pro praxi je vhodné si uvědomit, že je-li konduktivita κ měřena v $\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$ a koncentrace c udávána v $\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}$, vychází po dosazení hodnot v těchto jednotkách do vztahu (V-3) molární vodivost Λ v jednotkách $\text{S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}$. V těchto jednotkách je často hodnota molární vodivosti i tabelována.

Úkol: Na základě vodivostních měření stanovte disociační konstantu kyseliny octové a kyseliny monochloroctové.

Experimentální vybavení:

- roztoky kyseliny octové a monochloroctové o koncentracích 0,4; 0,2; 0,1; 0,05; 0,025; 0,0125 mol·dm⁻³
- roztok KCl (0,01 mol·dm⁻³)
- roztok KCl (0,1 mol·dm⁻³)
- konduktometr s vodivostní celou
- 8 kádinek o objemu 25 cm³

Pracovní postup: Pro určení odporové konstanty vodivostní cely změříme nejprve vodivost standardních roztoků KCl. Poté si do kádinky o objemu 25 cm³ nalejeme asi do půlky roztok nejzředěnější kyseliny octové a po ponoření vodivostní cely změříme jeho vodivost. Potom celu opláchneme trochou dalšího roztoku, vylejeme a po nalití čistého roztoku změříme vodivost. Tímto způsobem proměříme všechny připravené roztoky kyseliny octové a monochloroctové. (*Pozn.* Kyselina monochloroctová je nachystaná v kádinkách, změřte a nechejte v kádinkách)

Vyhodnocení:

- Nejprve vypočítáme odporovou konstantu vodivostní cely dle vztahu $\kappa_s / G_s = C$, kde G_s je hodnota vodivosti roztoku KCl dané koncentrace, kterou odečteme na konduktometru, a κ_s je známá konduktivita roztoku KCl (viz tabulka V-1)
- Potom přepočítáme všechny odečtené hodnoty vodivosti na konduktometru pomocí odporové konstanty C a tím dostaneme hodnoty konduktivity pro všechny měřené roztoky kyselin
- Pro každou kyselinu uvedeme tabulku V-3, kam zaneseme výsledky měření a další veličiny (dle vztahů V-3, V-4, V-6, V-7, V-8), pomocí kterých vypočítáme hodnoty disociační konstanty ze vztahu (V-9).
- Hodnotu molární vodivosti při nekonečném zředění Λ_∞ určíme podle Ostwaldova zředovacího zákona jako součet individuálních iontových vodivostí při mezním zředění.

Tabulka V-2: Molární iontové vodivosti při nekonečném zředění

ion	H_3O^+	CH_3COO^-	$\text{CH}_2\text{ClCOO}^-$
$\Lambda_\infty / (\text{S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1})$	349,8	40,8	39,8

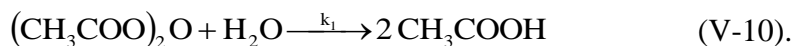
Tabulka V-3: Hodnoty naměřených a vypočtených veličin pro stanovení disociační konstanty pro kyselinu octovou a mochloroctovou

c [mol·dm ⁻³]	κ [mS·cm ⁻¹]	Λ [S·cm ² ·mol ⁻¹]	γ_±	α	I	K_A	pK_A
0,4000							
0,2000							
0,1000							
0,0500							
0,0250							
0,0125							

- **c** známe = uvedeno na zásobní lahvi
 - **κ** dostaneme tak, že hodnotu vodivosti, kterou odečteme na konduktometru, přepočítáme pomocí odporové konstanty C
 - **Λ** vypočítáme pomocí rovnice (V-3)
 - **α** vypočítáme pomocí rovnice (V-4)
 - **I** vypočítáme pomocí rovnice (V-8)
 - Dále pomocí rovnice (V-7) vypočítáme **log γ_±**, tuto hodnotu musíme odlogaritmovat, abychom dostali **γ_±**
 - **K_γ** vypočítáme pomocí rovnice (V-6)
 - a konečně pomocí vztahu (V-9) vypočítáme **K_A**
 - pak vypočítáme **pK_A** ($\text{pK}_A = -\log K_A$)
 - průměrnou hodnotu **pK_A** porovnáme s tabelovanou hodnotou a vyjádříme relativní odchylku v %
- Do **závěru** protokolu nezapomeňte uvést:
 - co bylo cílem úlohy, co jste stanovovali, jak jste to provedli
 - kde jsou uvedeny data (např. v tabulce 1, 2 atd.)
 - uveďte průměrnou hodnotu pK se směrodatnou odchylkou ($\text{pK} = \text{pK}_{\text{prům.}} \pm \text{směr. odch.}$)
 - okomentovat přesnost stanovení (jak velké jsou relativní chyby v % od tabelovaných hodnot – též uveďte, stačí uvést maximální relativní chybu)
 - pokud se něco nepovedlo, nezapomeňte to uvést a napsat pravděpodobnou příčinu nepřesnosti

5 b) KONDUKTOMETRICKÉ STANOVENÍ RYCHLOSTNÍ KONSTANTY HYDRATAČE ACETANHYDRIDU

Hydratace acetanhydridu probíhá podle rovnice



Protože koncentrace vody, která je zde ve značném nadbytku, se prakticky nemění, je možno tuto reakci interpretovat jako reakci 1. řádu. Tato reakce je příkladem reakce pseudoprvního řádu. K měření změny koncentrace acetanhydridu během reakce se používá vodivostního měření. Tento způsob měření má tu výhodu, že umožňuje nepřetržité sledování průběhu reakce bez odebrání vzorků. Vodivost roztoku se během průběhu reakce zvětšuje, protože vzniká částečně disociovaná kyselina octová. Vzhledem k tomu, že teoreticky je vodivost součtem příspěvků všech složek, ale jen dvě jsou proměnlivé (reaktant a produkt – koncentrace a vodivost vody zůstává konstantní) a jsou navíc vzájemně vázány bilanční rovnicí, platí po celou dobu reakce:

$$c_A = \text{konst} \cdot (\kappa - \kappa_\infty) \quad (\text{V-11})$$

a samozřejmě také

$$a = \text{konst} \cdot (\kappa_0 - \kappa_\infty) \quad (\text{V-12}),$$

kde κ_∞ je konduktivita reakční směsi na konci reakce, κ_0 je její konduktivita na počátku reakce, a κ je okamžitá konduktivita reakční směsi v čase t . Okamžitou konduktivitu lze vyjádřit jako funkci času:

$$\kappa = (\kappa_0 - \kappa_\infty) \cdot \exp[k \cdot t] + \kappa_\infty \quad (\text{V-13}),$$

resp. k vyjádřit

$$k = \frac{1}{t} \cdot \ln \frac{\kappa_0 - \kappa_\infty}{\kappa - \kappa_\infty} \quad (\text{V-14}).$$

Úkol: Stanovte konduktometricky rychlostní konstanty hydratace acetanhydridu při teplotách 25 °C, 30 °C, 40 °C, 50 °C

Experimentální vybavení:

- acetanhydrid
- konduktometr s vodivostní celou
- 4 odměrné baňky o objemu 50 cm³
- dělená pipeta 10 cm³
- reakční nádobka
- stopky

Pracovní postup: Reakce bude probíhat v termostatu nastaveném na 25 °C, v němž současně vytemperujeme potřebné množství acetanhydridu a destilované vody. Do suché odměrné baňky o objemu 50 cm³ napipetujeme suchou pipetou 6 cm³ acetanhydridu a ihned zazátkujeme. Vše musí být suché, protože reakce (hydratace) se spouští při kontaktu acetanhydridu s vodou. Do odměrného válce si odměříme 44 cm³ destilované vody. Vše umístíme do termostatu a necháme alespoň 10 min. vytemperovat. Do termostatu uchytíme i reakční nádobku, aby se též temperovala. Potom destilovanou vodu z odměrného válce nalejeme do odměrné baňky k acetanhydridu, zazátkujeme a rychle důkladně zamícháme. Poté obsah baňky nalejeme do reakční nádoby, kterou máme uchycenu v termostatu. Při smíchání obou reaktantů (v momentě, kdy začneme nalévat vodu z odměrného válce do odměrné baňky, kdy se dostanou do kontaktu voda a acetanhydrid) současně zapneme stopky, od tohoto okamžiku se spustila reakce. Do reakční nádoby hned ponoříme vodivostní čidlo (celý otvor musí být ponořen) a ihned změříme konduktivitu. Zapišeme si teplotu počátku reakce. Konduktivitu dále odečítáme (bez toho, že bychom vodivostní celou z roztoku vyndávali) nejprve 10× v intervalech po 20 s, pak 5× po 1 minutě, potom 5× po 2 minutách, 4× po 5 minutách a 4× po 10 minutách. Reakci lze považovat za prakticky ukončenou, když se během 15 minut nemění o více než 0,01 mS·cm⁻¹ (tato konduktivita se pak rovná hodnotě κ_{∞}). Během měření je vhodné vodivostním čidlem reakční směs v reakční nádobce promíchat. Hodnoty konduktivity si zapisujeme do předem připravené tabulky (Tabulka V-4). Pozor! odměrná baňka musí být suchá, pokud je v ní zbytek vody, ihned po nalití acetanhydridu se reakce rozběhne.

Ke konci měření (\approx na začátku 10-ti minutových intervalů) si nachystáme reakční složky pro měření při další teplotě, tj. do suché odměrné baňky o objemu 50 cm³ napipetujeme suchou pipetou 6 cm³ acetanhydridu a ihned zazátkujeme. Do odměrného válce si odměříme 44 cm³

destilované vody. Vše umístíme do termostatu a necháme temperovat prozatím při teplotě (25 °C) současného měření. Jak měření skočí při dané teplotě (25 °C), nastavíme termostat na teplotu pro další měření (30 °C) a necháme temperovat alespoň 10 min. Nesmíme zapomenout dát temperovat i reakční nádobku. Dále spustíme reakci a měření jako při předešlé teplotě (25 °C).

Při 30 °C konduktivitu odečítáme 10× po 20 s, 5× po 1 minutě, 5× po 2 minutách, 4× po 5 minutách a 4× po 10 minutách.

Při 40 °C konduktivitu odečítáme 10× po 10 s, 10× po 20 s, 5× po 1 minutě, 5× po 2 minutách, 2× po 5 minutách a 2× po 10 minutách.

Při 50 °C konduktivitu odečítáme 10× po 10 s, 10× po 20 s, 6× po 30 s, 5× po 1 minutě, 5× po 2 minutách.

Vyhodnocení:

- Hodnoty času, konduktivity a vypočítané rychlostní konstanty (rovnice V-14) zapíšeme do tabulky V-4

Tabulka V-4: Hydratace acetanhydridu při 25 °C, 30 °C, 40 °C, 50 °C

25°C			30°C		
t	κ	k	t	κ	k
[s]	[$\mu\text{S}\cdot\text{cm}^{-1}$]	[s^{-1}]	[s]	[$\mu\text{S}\cdot\text{cm}^{-1}$]	[s^{-1}]
0		κ_0	0		κ_0
20			20		
40			40		
60			60		
80			80		
100			100		
120			120		
140			140		
160			160		
180			180		
<u>200</u>			<u>200</u>		
260			260		
320			320		
380			380		
440			440		
<u>500</u>			<u>500</u>		
620			620		
740			740		
860			860		
980			980		
<u>1100</u>			<u>1100</u>		
1400			1400		
1700			1700		
2000			2000		

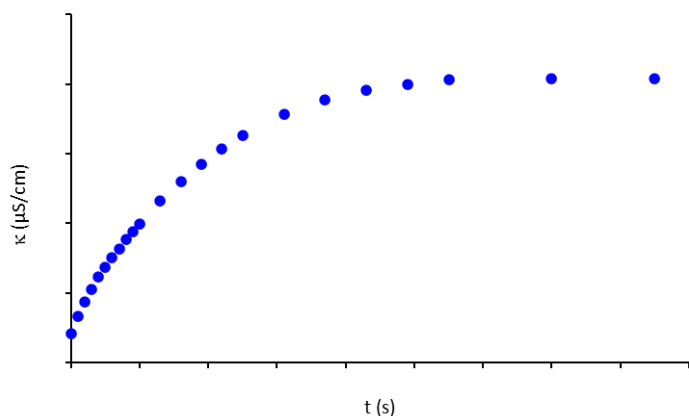
<u>2300</u>		
2900		
3500		
4100		
4700		κ_{∞}

<u>2300</u>		
2900		
3500		
4100		
4700		κ_{∞}

40°C		
t	κ	k
[s]	[$\mu\text{S}\cdot\text{cm}^{-1}$]	[s^{-1}]
0		κ_0
10		
20		
30		
40		
50		
60		
70		
80		
90		
<u>100</u>		
120		
140		
160		
180		
200		
220		
240		
260		
280		
<u>300</u>		
360		
420		
480		
540		
<u>600</u>		
720		
840		
960		
1080		
<u>1200</u>		
1500		
<u>1800</u>		
2400		
3000		κ_{∞}

50°C		
t	κ	k
[s]	[$\mu\text{S}\cdot\text{cm}^{-1}$]	[s^{-1}]
0		κ_0
10		
20		
30		
40		
50		
60		
70		
80		
90		
<u>100</u>		
120		
140		
160		
180		
200		
220		
240		
260		
280		
<u>300</u>		
330		
360		
390		
420		
450		
<u>480</u>		
540		
600		
660		
720		
<u>780</u>		
900		
1020		
1140		
1260		
1380		κ_{∞}

- κ_0 je první odečtená hodnota na konduktometru
- κ_∞ je poslední odečtená hodnota (maximální) na konduktometru
- Sestrojíme graf závislosti $\kappa = f(t)$ vždy pro danou teplotu.



- κ [$\mu\text{S}\cdot\text{cm}^{-1}$] (závisle proměnná) → osa y
- t [s] (nezávisle proměnná) → osa x
- velikost grafu alespoň 10 x 10 cm
- body izolované, nespojovat !!!
- rozsah os vhodně zvolíme dle naměřených hodnot, abychom využili celou plochu grafu pro naše naměřené hodnoty

Graf V-1: Závislost $\kappa = f(t)$ hydratace acetanhydridu (25°C)

- Do **závěru** protokolu nezapomeňte uvést:
 - co bylo cílem úlohy, co jste stanovovali, jak jste to provedli
 - kde jsou uvedena data (např. v tabulce 1, 2 atd.) a grafické závislosti (např. Graf 1 atd.)
 - pro každou teplotu uveďte průměrnou hodnotu rychlostní konstanty se směrodatnou odchylkou ($k = k_{\text{prům.}} \pm \text{směr. odch.}$) – nezapomeňte na jednotku !!!
 - pokud se něco nepovedlo, nezapomeňte to uvést a napsat pravděpodobnou příčinu nepřesnosti

5 c) ZÁVISLOST REAKČNÍ RYCHLOSTI NA TEPLOTĚ

V soulase s experimentálními výsledky vystihl Arrhenius závislost reakční rychlosti na teplotě rovnicí

$$k = A \cdot \exp [-E_A/RT] \quad (\text{V-15}),$$

kde E_A je Arrheniova aktivační energie, A je frekvenční faktor a R univerzální plynová konstanta.

Podle srážkové teorie je nutným předpokladem reakce srážka dvou molekul. Ne však každá srážka je účinná, účinná je pouze ta, při níž se molekuly srážejí s dostatečnou energií, nutnou k přesunu vazeb. Minimální energie srážky, nutná pro průběh reakce, se nazývá aktivační energie E_a . S Arrheniovou aktivační energií je ve vztahu $E_A = E_a + RT/2$, ale protože $E_a \gg RT/2$,

bývají E_a i E_A ztotožňovány. Arrheniova rovnice se tradičně pro další použití linearizuje, čímž nabývá tvaru

$$\ln k = \ln A - E_A/RT \quad (\text{V-16}).$$

V teorii absolutních reakčních rychlostí (Eyringova teorie) nověji nazývané teorií tranzitního stavu se předpokládá, že určujícím dějem je rovnováha mezi výchozími látkami a tzv. aktivovaným komplexem. Tato rovnováha je popsána rovnovážnou konstantou K^\ddagger , pro kterou platí:

$$k = \frac{RT}{Nh} \cdot K^\ddagger = k_B T/h \cdot K^\ddagger \quad (\text{V-17}),$$

kde N je Avogadrova konstanta, k_B Boltzmannova konstanta a h Planckova konstanta. Protože rovnovážnou konstantu je možno vyjádřit pomocí změny Gibbsovy energie aktivovaného komplexu, pro kterou platí:

$$\Delta G^\ddagger = \Delta H^\ddagger - T\Delta S^\ddagger \quad (\text{V-18}),$$

je možno výsledný výraz pro závislost rychlostní konstanty na teplotě (Eyringova rovnice) psát ve tvaru

$$k = \frac{k_B T}{h} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H^\ddagger}{RT}\right) \cdot \exp\left(\frac{\Delta S^\ddagger}{R}\right) \quad (\text{V-19}),$$

respektive v linearizované podobě

$$\ln k = \ln\left(\frac{k_B T}{h}\right) - \frac{\Delta H^\ddagger}{RT} + \frac{\Delta S^\ddagger}{R} \quad (\text{V-20}),$$

kde ΔH^\ddagger a ΔS^\ddagger jsou aktivační entalpie a aktivační entropie. Derivujeme-li Arrheniovu i Eyringovu rovnici podle teploty a obě porovnáme, dostaneme vztah

$$E_a = \Delta H^\ddagger + RT \quad (\text{V-21}).$$

Společným řešením rovnic (V-16), (V-20) a (V-21) získáme vztah pro výpočet aktivační entropie:

$$\Delta S^\ddagger = R(\ln A - \ln\left(\frac{k_B T}{h}\right) - 1) \quad (\text{V-22}).$$

Úkol: Stanovte aktivační veličiny (E_a , ΔS^\ddagger , ΔH^\ddagger) hydratace acetanhydridu.

Pro tento úkol použijeme data z předešlé úlohy 5 b).

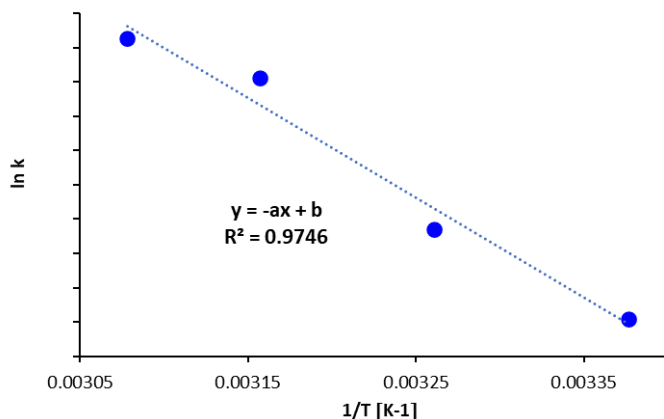
Vyhodnocení:

- do tabulky (V-5) zapíšeme hodnoty potřebné k výpočtu a vynesení grafické závislosti

Tabulka V-5: Hodnoty rychlostních konstant hydratace acetanhydridu pro různé reakční teploty

T [K]	1/T [K ⁻¹]	k [s ⁻¹]	ln k

- Sestrojíme graf závislosti $\ln k = f(1/T)$



Graf V-2: Závislost $\ln k = f(1/T)$ hydratace acetanhydridu

- **ln k** (závisle proměnná) → osa y
- **1/T [K⁻¹]** (nezávisle proměnná) → osa x
- velikost grafu alespoň 10 x 10 cm
- body izolované, nespojovat !!!
- lineární závislost → proložíme přímkou, uvést rovnici přímky a koeficient R^2
- rozsah os vhodně zvolíme dle naměřených hodnot, abychom využili celou plochu grafu pro naše naměřené hodnoty

- Z rovnice (V-16) vyplývá, že **směrnice** přímkové závislosti $\ln k = f(1/T)$ odpovídá $-E_A/R$

$$\ln k = \ln A - E_A/RT$$

obecná rovnice přímky $y = b - a x$

- a** (směrnice přímky) = $-E_A/R$, odtud potom vypočítáme hodnotu $-E_A = -a \cdot R$
- posunutí** přímky **b** představuje $\ln A$ z rovnice (V-16); pro další výpočet nemusíme odpogarithmovávat, v dalším výpočtu (V-22) je potřeba $\ln A$
- při znalosti $\ln A$ potom můžeme pro teplotu 298 K vypočítat aktivační entropii ΔS^\ddagger pomocí rovnice (V-22)
- pomocí rovnice (V-21) vypočítáme aktivační entalpii ΔH^\ddagger
- a nakonec pomocí rovnice (V-18) vypočítáme změnu Gibbsovy energie aktivovaného komplexu ΔG^\ddagger

- Do **závěru** protokolu nezapomeňte uvést:
 - co bylo cílem úlohy, co jste stanovovali, jak jste to provedli
 - kde jsou uvedena data (např. v tabulce 1, 2 atd.) a grafické závislosti (např Graf 1 atd.)
 - uveďte vypočítané hodnoty stanovovaných veličin
 - pokud se něco nepovedlo, nezapomeňte to uvést a napsat pravděpodobnou příčinu nepřesnosti