

# Az Arrhenius-egyenlet alkalmazásai

## A Clausius–Clapeyron-egyenlet kiértékelése

Kiindulás: hőmérséklet- és nyomásértékek mérése

A mért adatok mellett mindig feltüntetjük az abszolút hőmérséklet reciprokát. A nyomásnak pascalban mért értéke mellé kiszámítjuk annak a természetes logaritmusát.

Clausius–Clapeyron-egyenlet alkoholra				
t, °C	1/T, 1/K	p, Pa	ln(p, Pa)	
88,85	0,002762	151530	11,9285	
90,85	0,002747	163067	12,0019	
92,85	0,002732	175321	12,0744	
94,85	0,002717	188324	12,1459	
96,85	0,002703	202112	12,2166	
98,85	0,002688	216720	12,2864	
100,85	0,002674	232200	12,3554	
->	100,00	0,002680	225547	12,3263
<	78,21	0,002846	101325	11,5261
<	77,87	0,002849	100000	11,5129
$r^2 =$	0,9999982		-4815,1769*8,31446	KITEVŐ(25,2304148)
A=	-4815,177	$\Delta E$	-40035,6056 J/mol	nyomás végtelen hőmérsékleten
B=	25,230415			90662965818 Pa

Lineáris regressziót számítunk. Ennek meredeksége -4815,1769, tengelymetszete 25,230415.

Az A és B betűt néha felcserélik; itt most a jelentése lényeges.  $p = B \cdot e^{\frac{A}{T}}$ , aktuálisan

$$p = 25,2304 \cdot e^{\frac{-4815,1769}{T}}. \text{ A kitevőben a számláló és nevező mértékegysége azonos: kelvin.}$$

A kitevőből kapjuk az aktiválási energiát  $\Delta E = A \cdot R = 4815,1769 \cdot 8,3144621 = 40035,606$ ; s ez nem más, mint a párolgáshő. Mennyiségegyenlet formájában

$$\Delta E = A \cdot R = 4815,1769 \text{ K} \cdot 8,3144621 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 40035,606 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Moláris tömege 0,04607 kg/mol, ezzel a fajlagos párolgáshő

$$\Delta H = \frac{40035,606 \text{ J/mol}}{0,04607 \text{ kg/mol}} = 869016,8 \frac{\text{J}}{\text{kg}} \text{ (a példában kb. 2 bar nyomással számoltunk)}$$

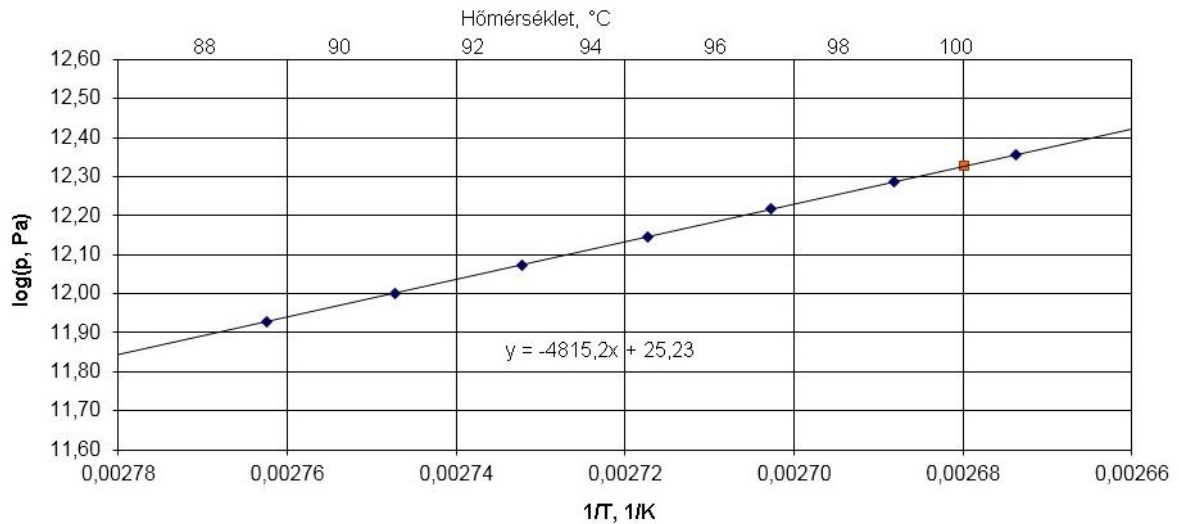
Logaritmikus alakra hozva

$$\ln p = 25,230415 + \frac{-4815,1769}{T} \rightarrow \ln p = \ln 90662965818 + \frac{-4815,1769}{T}$$

Ennek mértékegysége természetesen pascal. Alkalmazva a logaritmus azonosságait

$$\ln p - \ln 90662965818 = \frac{4815,1769}{T}, \text{ s ez hányados logaritmus: } \ln \frac{p}{90662965818} = \frac{4815,1769}{T}.$$

Víz esetén hasonló eredményre jutottunk volna, például:  $\ln \frac{p}{32814675383} = \frac{4730,6247}{T}$  (a kritikus pont alatt, +330 °C környezetében).



Visszatérve az alkoholra, párolgáshője

$$\Delta E = A \cdot R = 4730,6247\text{K} \cdot 8,3144621 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 39332,599 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

## A függvény elemzése az alkohol példájával

A függvény valóságos értékei csak abban a tartományban értelmezhetők, ahol az anyag folyékony halmazállapotban létezik, tehát a hármaspont és a kritikus pont között. Ezek:

alkohol valódi adatai	hármaspont	kritikus pont
hőmérséklet	-123°C; 150 K	+241°C; 514 K
nyomás	0,00043 Pa	6 300 000 Pa; 63 bar

Az egyenlet kiterjesztése (extrapolálása) fizikai tartalommal nem bír, csupán matematikai értelme van. Lássuk ezek szélsőséges adatait, ezek az illesztett függvény bal-és jobboldali tengelymetszetei:

az illesztett függvény	a nyomás alsó határértéke (elméletileg nulla)	a hőmérséklet reciprok értéke nulla	a hőmérséklet reciprok értéke negatív szám
hőmérséklet	$\approx -267^\circ\text{C}$ ; $\approx 6,1\text{ K}$	$\infty\text{ K}$	$1/T < 0$
nyomás	$\ln p_{Pa} \approx -745$ ; $p \approx 10^{-307}\text{ Pa}$	$\ln p_{Pa} = 25,23$ ; $p = 90\,662\,965\,818\text{ Pa}$	értelmezhetetlen

A következő ábrán azt szemléltetjük, milyen volna a kiterjesztett diagram, ha megkísérelnénk megkeresni a nulla és a végtelen hőmérsékletet, illetve a nulla és végtelen nyomást. Balra csak az abszolút nulla fokig terjesztetnénk ki a diagramot; jobbra a végtelen hőmérsékletig ábrázoltuk. Lefelé a végtelen alacsony nyomások tartománya látható; felfelé az ábra befejeződése is látható. T.i. végtelen nagy hőmérsékleten a nyomás logaritmusa 24,214. A számítások a zöld színnel jelölt tartomány alapján készültek (a kritikus pont alatt).

