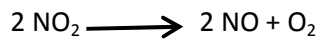


## Németh Norbert megoldása

**4. feladat:** Az NO<sub>2</sub> gázfázisú bimolekulás reakcióban bomlik NO és O<sub>2</sub> képződése mellett a



reakció szerint. A  $v=k[\text{NO}_2]^2$  alakú sebességi egyenlet sebességi együtthatójának hőmérséklet függését az alábbi mérési adatok adják meg:

T/K	700	1000
$k/(\text{cm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1})$	$9,7 \cdot 10^3$	$3,1 \cdot 10^6$

Határozzuk meg a sztérikus faktort (f) és a reaktív ütközési hatáskeresztmetszet ( $\sigma$ )<sup>\*</sup> értékét, ha  $\sigma=0,60 \text{ nm}^2$ -nek adódott.

### Megoldás:

Az effektív tömeg ( $\mu$ ) számítása:

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \quad \text{itt ez esetben az } M_1 = M_2 \text{-vel mivel két NO}_2 \text{ molekuláról beszélünk.}$$

$$M_1 = 46,0 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{vagyis} \quad \mu = \frac{(46,0 \text{ g mol}^{-1})^2}{2(46,0 \text{ g mol}^{-1})} = 23 \text{ g mol}^{-1} = 0,023 \text{ kg mol}^{-1}$$

A sztérikus faktor (f) számítása két ismeretlenes egyenlettel:

$$k = f \sigma N_A \left( \frac{8RT}{\pi \mu} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\Delta E \ddagger}{RT}\right) \longrightarrow k \left( \frac{\pi \mu}{8RT} \right)^{1/2} \frac{1}{N_A \sigma} = f \exp\left(-\frac{\Delta E \ddagger}{RT}\right) \longrightarrow -\ln\left(\frac{k \left( \frac{\pi \mu}{8RT} \right)^{1/2} \frac{1}{N_A \sigma}}{f}\right) * RT = \Delta E \ddagger$$

$$1) -\ln\left(\frac{k_1 \left( \frac{\pi \mu}{8RT_1} \right)^{1/2} \frac{1}{N_A \sigma}}{f}\right) * RT_1 = \Delta E \ddagger$$

$$2) -\ln\left(\frac{k_2 \left( \frac{\pi \mu}{8RT_2} \right)^{1/2} \frac{1}{N_A \sigma}}{f}\right) * RT_2 = \Delta E \ddagger$$

- 1.)  $N_A$  : Avogadro – állandó
- 2.) R: ideális gázállandó
- 3.)  $\Delta E \ddagger$  : aktiválási energia
- 4.)  $\sigma$ : hatáskeresztmetszet
- 5.)  $\mu$ : effektív tömeg

$$-\ln\left(\frac{k_1 \left( \frac{\pi \mu}{8RT_1} \right)^{1/2} \frac{1}{N_A \sigma}}{f}\right) * RT_1 = -\ln\left(\frac{k_2 \left( \frac{\pi \mu}{8RT_2} \right)^{1/2} \frac{1}{N_A \sigma}}{f}\right) * RT_2$$

$$\frac{T_1}{T_2} = \frac{\ln\left(\frac{k_2 \left(\frac{\pi\mu}{8RT_2}\right)^{1/2} \frac{1}{N_A} \frac{1}{\sigma}}{f}\right)}{\ln\left(\frac{k_1 \left(\frac{\pi\mu}{8RT_1}\right)^{1/2} \frac{1}{N_A} \frac{1}{\sigma}}{f}\right)}$$

$$\sigma = 0,60 \text{ nm}^2 = 0,60 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$$

$$k_1 = 9,7 \cdot 10^3 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} = 9,7 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = 3,1 \cdot 10^6 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} = 3,1 \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ átalakításával:}$$

$$\frac{700 \text{ K}}{1000 \text{ K}} = \frac{\ln\left(\frac{3,1 \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} \cdot \left(\frac{\pi \cdot 0,023 \text{ kg mol}^{-1}}{8 \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{molK}} \cdot 1000 \text{ K}}\right)^{1/2} \frac{1}{6,022 \cdot 10^{23}} \frac{1}{0,6 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2}}{f}\right)}{\ln\left(\frac{9,7 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} \cdot \left(\frac{\pi \cdot 0,023 \text{ kg mol}^{-1}}{8 \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{molK}} \cdot 700 \text{ K}}\right)^{1/2} \frac{1}{6,022 \cdot 10^{23}} \frac{1}{0,6 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2}}{f}\right)} = \frac{\ln(8,94 \cdot 10^{-9}) - \ln(f)}{\ln(3,34 \cdot 10^{-11}) - \ln(f)}$$

$$0,7 \cdot \ln(3,34 \cdot 10^{-11}) - 0,7 \cdot \ln(f) = \ln(8,94 \cdot 10^{-9}) - \ln(f)$$

$$\ln(f) = -5,49 \quad \longrightarrow \quad \underline{f = 4,13 \cdot 10^{-3}}$$

$$\text{(Emlékeztető: } 1 \text{ J} = 1 \text{ Nm} = 1 \frac{\text{kgm}^2}{\text{s}^2}\text{)}$$

$$\text{Mivel } \sigma^* = \sigma f \quad \text{A reaktív hatáskeresztmetszet: } \sigma^* = 4,13 \cdot 10^{-3} \cdot 0,60 \text{ nm}^2 = \underline{2,48 \cdot 10^{-3} \text{ nm}^2}$$