

1. feladat (10 pont)

A dimetil-éter termikus bomlását úgy vizsgálták, hogy mérték a nyomás növekedését az idő függvényében.



A következő táblázat adatait 777 K hőmérsékleten és 312 Hgmm (torr) kezdeti nyomáson határozták meg. Mutassa meg, hogy a reakció elsőrendű, és határozza meg a sebességi együtthatót!

Idő/s	390	777	1195	2000	3155
Nyomásnövekedés/Hgmm	96	179	250	363	467

2. feladat (10 pont)

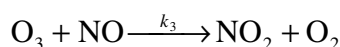
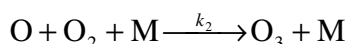
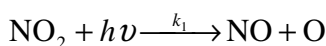
A *cisz*- és *transz*-cinnamonitril ($\text{C}_6\text{H}_5=\text{CHCN}$) alábbi relatív koncentrációit mérték az idő függvényében egy olyan oldatban, amely kezdetben csak *cisz*-cinnamonitrilt tartalmazott.

<i>t</i> /s	0	10^3	2×10^3	3×10^3	5×10^3	10^5
<i>cisz</i>	0,98	0,92	0,81	0,77	0,67	0,42
<i>transz</i>	0,02	0,08	0,19	0,23	0,33	0,58

Számítsa ki az egyensúlyi állandót, és az előre- és visszairányuló reakciók sebességi együtthatóit.

3. feladat (12 pont)

A szennyezett városi légkörben O_3 , NO_2 és NO a következő módon reagálnak:



Mutassa meg, hogy ha kvázistacionaritást tételezünk fel az $[\text{O}]$ -ra és az $[\text{O}_3]$ -ra, akkor

$$[\text{O}_3] = \frac{k_1[\text{NO}_2]}{k_3[\text{NO}]}$$

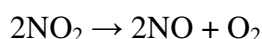
Egy erőműtől szélirányban 22 kilométernyire mérték a NO , NO_2 és O_3 koncentrációját a füstfáklya közepétől vett d távolság függvényében. Egy adott időpontban a következő értékeket kapták:

d/km	0	4,86	12,9
$[\text{NO}]/\text{ppb}$	20,3	10,5	5,4
$[\text{NO}_2]/\text{ppb}$	74,5	49,1	30,2
$[\text{O}_3]/\text{ppb}$	85,0	108	129

Mutassa meg, hogy ezek az adatok megfelelnek a fotostacionárius állapotnak.

4. feladat (12 pont)

Az NO_2 gázfázisú bimolekulás reakcióban bomlik NO és O_2 képződése mellett a



reakció szerint. A $v = k[\text{NO}_2]^2$ alakú sebességi egyenlet sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggését az alábbi mérési adatok adják meg. Határozzuk meg a sztérikus faktor és a reaktív ütközési hatáskeresztmetszet értékét, ha $\sigma = 0,60 \text{ nm}^2$ -nek adódott.

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

KÉPLETGYŰJTEMÉNY

$$N_A = 6,0221 \cdot 10^{23} \quad R = 8,3145 \frac{J}{mol \cdot K} \quad c = 2,9979 \cdot 10^8 \frac{m}{s} \quad k = \frac{R}{N_A} = 1,3807 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$$

$$m_{ae} = 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$v = \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_B} \frac{dn_B}{dt} \quad \frac{dc_P}{dt} = kc_A^{r_A} c_B^{r_B} \dots \quad c_1 - c_0 = -k(t_1 - t_0)$$

$$c_{A,t} = c_{A,0} \exp(-kt) \quad \frac{1}{c_{A,t}} - \frac{1}{c_{A,0}} = kt \quad \frac{1}{(c_{B,0} - c_{A,0})} \ln \frac{c_{B,t} c_{A,0}}{c_{A,t} c_{B,0}} = kt \quad t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

$$t_{1/2} = \frac{1}{kc_{A,0}} \quad t_{1/2} = \frac{2^{r-1} - 1}{(r-1)kc_{A,0}^{r-1}}$$

$$k = A \exp\left(-\frac{\Delta E^\ddagger}{RT}\right)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = k_1 c_{A,0} \exp(-(k_1 + k_2)t)$$

$$c_{A,t} = \frac{k_2}{(k_1 + k_2)} c_{A,0} + \left[\frac{k_1}{(k_1 + k_2)} c_{A,0} \right] \exp(-(k_1 + k_2)t)$$

$$c_{A,t} = c_{A,0} \exp(-k_1 t) \quad c_{B,t} = \frac{k_1}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)] c_{A,0}$$

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

$$k = K^\ddagger k^\ddagger = \frac{k_B T}{h \nu^\ddagger} \bar{K} \kappa \nu^\ddagger = \kappa \frac{k_B T}{h} \bar{K} = \kappa \frac{k_B T}{h} \left(\frac{RT}{p^\circ}\right) \left(\frac{N_A \bar{q}_{C^\ddagger}^\circ}{q_A^\circ q_B^\circ}\right) \exp\left(\frac{-\Delta E_0}{RT}\right)$$

$$k = K^\ddagger k^\ddagger = \kappa \frac{k_B T}{h} \bar{K} = \kappa \left(\frac{k_B T}{h}\right) \left(\frac{RT}{p^\circ}\right) \exp\left(\frac{\Delta_r S^{\circ\ddagger}}{R}\right) \exp\left(\frac{-\Delta_r H^{\circ\ddagger}}{RT}\right)$$