

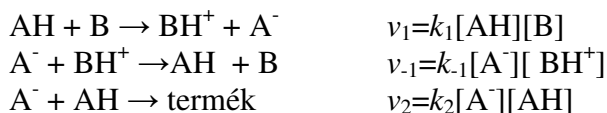
1. feladat (7 pont)

Az alábbi kinetikai adatokat felhasználva határozza meg az A, B és C anyagok részrendjeit! Számítsa ki a sebességi állandót!

	[A]/(mol/dm ³)	[B]/(mol/dm ³)	[C]/(mol/dm ³)	v/(mol/dm ³ /s)
1. mérés	4,0	0,60	1,0	3,8*10 ⁷
2. mérés	4,0	0,60	0,50	1,9*10 ⁷
3. mérés	4,0	0,20	0,50	6,4*10 ⁶
4. mérés	2,0	0,20	0,50	1,6*10 ⁶

2. feladat (8 pont)

Az acetone [(CH₃)₂CO] kondenzációs reakcióját vizes oldatban bázisok katalizálják. A B bázis reverzibilis folyamatban reagál az acetonnal és a C₃H₅CO⁻ karbanion képződik. A képződő karbanion egy másik acetonnal reagálva alakul terméké. A mechanizmus vázlatja a következő:



ahol AH az acetont, A⁻ a karbaniont jelöli. Határozzuk meg a karbanion stacionárius (steady-state) koncentrációját és vezessük le a termék képződésének a sebességi egyenletét.

3. feladat (15 pont)

Egy kémiai reakcióról a következőket tudjuk. A reakció sebessége csak egyetlen komponens koncentrációjától függ ($v = k[\text{A}]^r$). E komponens fogyását spektrofotometriás módszerrel követjük szobahőmérsékleten (25 °C). Az alábbi abszorbancia adatokat mérjük akkor, ha a reakcióban részt vevő komponens kezdeti koncentrációja 1 mol/dm³ volt:

$$\begin{array}{ll} t=0 \text{ perc} & A=0,512 \\ t=15,2 \text{ perc} & A=0,256 \end{array}$$

A kiindulási elegy 1:1 arányú hígításának hatására adataink a következőképp változtak (a hőmérséklet állandó):

$$\begin{array}{ll} t=0 \text{ perc} & A=0,256 \\ t=30,4 \text{ perc} & A=0,128 \end{array}$$

Figyelem! Az abszorbancia arányos az egyetlen fényelnyelő komponens koncentrációjával!

Mi a reakció rendje (egész rendű reakció!)? Számolja ki a reakciósebességi állandót a számolt reakciórendhez legközelebb eső egész rendű reakcióra! A hőmérséklet 10 °C fokkal történő emelése a reakciósebességi állandó értékét megkétszerezi. Mekkora a reakció aktiválási energiája?

4. feladat (20 pont)

Legyen ismert egy kémiai reakció reakciósebességi tényezője és aktiválási energiája 25 °C hőmérsékleten. Ezek az adatok egyezzenek meg az előző feladatban kiszámolt reakciósebességi állandóval és aktiválási energiájával! Ha nem sikerült kiszámolni ezeket a mennyiségeket, akkor használja a $k=1,2 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ és az $E_a=46,8 \text{ kJ/mol}$ értékeket!

Számolja ki a preexponenciális tényezőt! Számolja ki a reakció reaktív ütközési hatáskeresztmetszetét! Tételezzük fel, hogy a reakció gázfázisban megy végbe, a sztérikus faktor egységnyi ($f=1$) és két azonos tömegű ($M=16 \text{ g/mol}$) részecske ütközik a reakció során! Számítsuk ki a reakció aktiválási entalpiáját, entrópiáját, és szabadentalpiáját 25 °C hőmérsékleten!

KÉPLETGYŰJTEMÉNY

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$E_a = \Delta_r H^\circ + RT \quad \text{oldatfázisban lejátszódó reakciók}$$

$$E_a = \Delta_r H^\circ + 2RT \quad \text{bimolekulás gázreakciók}$$