

1. feladat (10 pont)

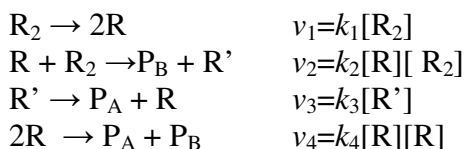
A ciklopropán 500 °C-on gázfázisban propénné izomerizálódik. A konverzió változását gázkromatográfiásan követték adott ideig, különböző kezdeti nyomásokról indulva:

p_0/Torr	200	200	400	400	600	600
t/s	100	200	100	200	100	200
p/Torr	186	173	373	347	559	520

p_0 a ciklopropán kezdeti, p pedig t időhöz tartozó parciális nyomása. Számítsuk ki a sebességi állandót és a rendűséget az adott körülmények között.

2. feladat (10 pont)

Vizsgáljuk meg az R_2 -molekula következő mechanizmus szerinti termikus bomlási reakcióját:



ahol R_2 , P_A és P_B stabilis szénhidrogének, míg R és R' gyökök. Vezessük le az R_2 bomlása sebességének függését az R_2 koncentrációjától.

3. feladat (10 pont)

Az etil-acetát elszappanosítási reakciójának sebességi állandója $0,11 \text{ mol}^{-1}\cdot\text{dm}^3\cdot\text{s}^{-1}$. Írja fel a reakció egyenletét szerkezeti képletekkel! Állapítsa meg a reakció rendűségét a sebességi állandó dimenziója alapján! Írja fel a reakció sebességi egyenletét! A reakcióban (és a sebességi egyenletben is) mindkét lenti komponens részt vesz! Mekkora az észter koncentrációja (a) 10 s és (b) 10 perc múlva, ha az 1:1 térfogat arányban összeöntendő reaktánsok összeöntés előtti koncentrációja $[\text{NaOH}] = 0,1 \text{ mol}\cdot\text{dm}^{-3}$ és $[\text{etil-acetát}] = 0,2 \text{ mol}\cdot\text{dm}^{-3}$.

4. feladat (15 pont)

Gyakran emlegetik, hogy 10 °C hőmérsékletemelkedés sok esetben megduplázza egy reakció sebességi együtthatóját. Ha ez teljesül egy reakcióra, amikor a hőmérséklet 20 °C-ról 30 °C-ra emelkedik, mekkora a reakció aktiválási energiája? Mekkora az aktiválási energia, ha k duplázása akkor teljesül, ha a hőmérséklet 186 °C-ról 196 °C-ra emelkedik?

Előfordulhat összetett reakcióknál olyan eset is, hogy 10 °C hőmérsékletemelkedés megfelel egy reakció sebességi együtthatóját. Ha ez teljesül egy reakcióra, amikor a hőmérséklet 20 °C-ról 30 °C-ra emelkedik, mekkora a reakció aktiválási energiája? Ez az eset hogyan lehetséges?

KÉPLETGYŰJTEMÉNY

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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