

Reakciókinetika IV.: Reakciók molekuláris dinamikája

- F119. A bimolekuláris reakciók ütközési elméletének egyik legfontosabb eredménye az, hogy meg tudjuk mondani, milyen arányban vannak azok a molekuláris ütközések, amelyeknek kinetikus energiája (a haladás irányában) legalább E_a vagy annál nagyobb. Mennyi ez az arány 298, illetve 1000 K hőmérsékleteken
- $E_a = 10,0 \text{ kJ mol}^{-1}$ és
 - $E_a = 100 \text{ kJ mol}^{-1}$ esetén?

- F120. A metilgyökök dimerizációjának preexponenciális tényezőjét $25,0 \text{ °C}$ -on $2,4 \cdot 10^{10} \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ értékűnek találták. Mekkora a reakció hatáskeresztmetszete (σ) és sztérikus faktora (P), ha egy C–H kötés kötéhossza 154 pm ?

- F121. *Cis*-azoalkán termolízisét vizsgálták etanolban a fejlődő nitrogéngáz térfogatának mérésével. A következő sebességi együtthatókat kapták:

T/K	248,36	252,42	256,13	260,15	264,20
$10^4 \cdot k/\text{s}^{-1}$	1,22	2,31	4,39	8,50	14,3

Számítsa ki a reakció aktiválási entalpiáját, entrópiáját, energiáját és szabadentalpiáját $20,0 \text{ °C}$ -ra. –

- F122. Számítsa ki a moláris aktiválási entrópiát arra a gázreakcióra, amelyben két, lényegében szerkezet nélküli részecske ütközik 300 K hőmérsékleten. Az ütköző részecskék moláris tömege 50 g mol^{-1} és az ütközés reaktív hatáskeresztmetszete (σ^*) $0,4 \text{ nm}^2$.

- F123. Két részecske reakcióját vizsgálták vizes oldatban az ionerősség függvényében, $25,0 \text{ °C}$ -on. A következő eredményeket kapták:

$I/(\text{mol kg}^{-1})$	0,0025	0,0037	0,0045	0,0065	0,0085
$k/(\text{dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1})$	1,05	1,12	1,16	1,18	1,26

Ismert, hogy a sebességmeghatározó lépésben az egyik reakciópartner egységnyi töltésű. Milyen előjelű, és mekkora a másik részecske töltése? A Debye–Hückel-törvény állandója ezen a hőmérsékleten $0,509 \text{ mol}^{-1/2} \text{ kg}^{1/2}$.

- F124. Az A és B semleges részecskék között $40,0 \text{ °C}$ -on diffúziógátolt ($A + B \rightarrow P$) reakció játszódik le olyan oldószerben, melynek viszkozitása (η) ezen a hőmérsékleten $2,37 \text{ cP}$. Számítsa ki a termékképződés kezdeti sebességét, ha a kiindulási koncentrációk a következők: $[A]_0 = 0,150 \text{ mol dm}^{-3}$ és $[B]_0 = 0,330 \text{ mol dm}^{-3}$.

- F125. Az $1,00 \text{ mol dm}^{-3}$ koncentrációjú HI-gázban 283 °C -on a molekulák idő- és térfogategységre vonatkozó ütközési száma $6,0 \cdot 10^{31} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$. A reakció aktiválási energiája 187 kJ mol^{-1} . Számítsuk ki a reagáló molekulák számát $1,00 \text{ cm}^3$ térfogatban, $1,0 \text{ s}$ alatt. Mennyi a sebességi együttható?

F126. A bimolekulás $2\text{HI}(g) = \text{H}_2(g) + \text{I}_2(g)$ reakció aktiválási energiája $186,7 \text{ kJ mol}^{-1}$. A gömb alakú HI-molekula átmérője 350 pm . Az ütközési elmélet alapján határozzuk meg a reakció sebességi együtthatóját hat hőmérsékletre, és vessük egybe a következő táblázatban talált kísérleti adatokkal:

T/K	556	629	666	683	716	781
$k_{\text{mért}}/(\text{M}^{-1} \text{ s}^{-1})$	$3,517 \cdot 10^{-7}$	$3,02 \cdot 10^{-5}$	$2,195 \cdot 10^{-4}$	$5,115 \cdot 10^{-4}$	$2,501 \cdot 10^{-3}$	$3,954 \cdot 10^{-2}$

F127. A $2 \text{NO}(g) \rightarrow \text{N}_2(g) + \text{O}_2(g)$ másodrendű reakcióra 1423 K -en és 1681 K -en rendre $k \cdot p^{\ominus}/(RT)^2 = 1,819 \cdot 10^{-5} \text{ mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-1} \text{ s}^{-1}$ és $5,668 \cdot 10^{-4} \text{ mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Mennyi ΔS^\ddagger és ΔH^\ddagger értéke?

F128. Az ózon gázfázisú bomlásának preexponenciális tényezője kis nyomáson $4,60 \cdot 10^{12} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$, aktiválási energiája pedig $10,0 \text{ kJ mol}^{-1}$. Mekkora az

- aktiválási entrópia,
- aktiválási entalpia és
- aktiválási szabadentalpia 298 K hőmérsékleten?