

Fizikai Kémia II. számolási gyakorlat
Házi feladatok
2014. 09. 18.

1. feladat (09. 25.-ig)

Az $S(U, V, n)$ függvényből fejezze ki a $H, F, G, T, P, \mu, c_v, c_p$ mennyiségeket.

2. feladat (10. 03.-ig)

Számolja ki a $H_2 + O_2 = 2 OH$ reakció egyensúlyi állandóját 1000 K hőmérsékleten! A számoláshoz az alábbi forgási és rezgési állandókat (cm^{-1} mértékegységben), illetve 0 K-en számolt képződési energiákat használja (hartree mértékegységben).

$$\begin{array}{lll} B_{H_2} = 60.679 \text{ cm}^{-1} & B_{O_2} = 1.3433 \text{ cm}^{-1} & B_{OH} = 18.823 \text{ cm}^{-1} \\ \tilde{\nu}_{H_2} = 4470.7 \text{ cm}^{-1} & \tilde{\nu}_{O_2} = 2011.8 \text{ cm}^{-1} & \tilde{\nu}_{OH} = 4010.1 \text{ cm}^{-1} \\ \Delta E_{0H_2} = -1.168011 \text{ hartree} & \Delta E_{0O_2} = -150.162741 \text{ hartree} & \Delta E_{0OH} = -75.648873 \text{ hartree} \end{array}$$

3. feladat (10. 03.-ig)

Milyen és mennyi molekuláris paraméter ismeretére lenne szükség a $H_2 + O_2 \rightarrow 2 OH$ reakció sebességi együtthatójának meghatározásához az átmeneti állapot elmélet alapján? (A válasz jellege a következő példát kövesse: „a H_2 molekula tömege, 5 rezgési állandója”)

4. feladat (10. 10.-ig)

Gipszet ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$) hevítve az vizet veszít és kalcium-szulfid hemihidrátta ($CaSO_4 \cdot 1/2H_2O$) alakul. A reakció sebességi együtthatója $100^\circ C$ -on 0.75 min^{-1} . Mennyi idő alatt képződik 2 kg víz, 10 kg gipszből $100^\circ C$ -on? (Kizárólag a bomlási reakció lejátszódását feltételezve)

5. feladat (10. 10.-ig)

Egy anyag koncentrációját mérték az idő függvényében, és a következő értékeket kapták:

t / s	$c / \text{mol dm}^{-3}$
0	0.554
7	0.164
15	0.0910
22	0.0655
30	0.0496

Mi a reakció rendje és sebességi együtthatója?

6. feladat (11. 05.-ig)

A NO_2 és fluor reakcióját a következő, elemi reakciókat tartalmazó mechanizmussal lehet leírni, magas nyomáson, 500 K hőmérsékleten :



Mennyi a fluor atomok kvázistacionárius koncentrációja, ha $c(\text{NO}_2) = 2.80 \text{ mmol/dm}^3$ és $c(\text{F}_2) = 0.50 \text{ mmol/dm}^3$?

7. feladat (11. 05.-ig) (2 pont)

Az előző feladatban szereplő $\text{NO}_2 + \text{F} \rightarrow \text{NO}_2\text{F}$ és $\text{F}_2 \rightarrow \text{F} + \text{F}$ reakciók sebességi együtthatói mutathatnak nyomásfüggést.

a) Fejezze ki a fluor atomok kvázistacionárius koncentrációját, ha a k_3 nyomásfüggése a Lindemann formalizmus alapján felírható.

b) Számítsa ki a fluor atomok kvázistacionárius koncentrációját 0.50 atm nyomáson, ha a következőket tudjuk:

- A 6. feladatban megadott k_2 és k_3 nyomásfüggése leírható a Lindemann modell alapján
- A 6. feladatban megadott k_2 és k_3 a magas nyomású határértékek
- A $\text{NO}_2 + \text{F} \rightarrow \text{NO}_2\text{F}$ reakció sebességi együtthatója még 0.50 atm nyomáson is a magas nyomású határ közelében van
- A $\text{F}_2 + \text{M} \rightarrow \text{F} + \text{F} + \text{M}$ reakció sebességi együtthatójának alacsony nyomású határa a következő: $k_{3,p=0} = 1.22 \cdot 10^1 \text{ dm}^3 / \text{mol s}$

8. feladat (11. 28-ig)

Az aktiválási energia általánosan az alábbi képlettel fejezhető ki:

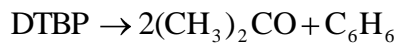
$$E_a = -R \frac{d \ln k}{d1/T}$$

Határozza meg az aktiválási energiát, ha egy sebességi együttható a hőmérséklet függvényében a kiterjesztett Arrhenius egyenlettel írható le.

$$k = A \cdot T^n \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

9. feladat (11. 28-ig)

A ditercierbutil-peroxid (DTBP) a következő elsőrendű reakcióban bomlik:



$p = 0.88$ bar kezdeti nyomású tiszta DTBP-t zárt reaktorban, állandó nyomáson tartunk. 95 perc elteltével a nyomás a reaktorban 1.33 bar, és nem volt megfigyelhető egyik anyag kondenzációja sem. Határozza meg a DTBP bomlásának sebességi együtthatóját.

10. feladat (11. 28-ig)

A hidrogén peroxid unimolekulás bomlását két OH gyökké az alábbi kis és nagy nyomásra extrapolált sebességi együtthatókkal lehet leírni.

$$k_\infty = 3.00 \cdot 10^{14} \cdot \exp\left(-\frac{23000}{RT}\right) \text{s}^{-1} \quad k_0 = 1.86 \cdot 10^{16} \cdot \exp\left(-\frac{18000}{RT}\right) \text{cm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$$

1800 K hőmérsékleten, mekkora nyomáson lesz az unimolekulás bomlási együttható a magas nyomású határ 15% -a?