

1. ZH, 2012. október 11.

EHA: POETAAT. ELTE

1. Egy gázfázisú reakció bruttó egyenlete  $\text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 2 \text{NO}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2$ 

A reakciósebességi együttható hőmérsékletfüggése a  $k = A \exp(-E_a/RT)$  Arrhenius egyenletet követi. A reakciósebesség  $-5,00^\circ\text{C}$  hőmérsékleten  $k = 3,46 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ , míg  $+25,00^\circ\text{C}$  hőmérsékleten  $k = 8,87 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ . Mekkora a reakció aktiválási energiája? (10 pont)

2. Savas kémhatású vizes oldatban a következő reakció játszódik le a bromid és bromát ionok között:  $\text{BrO}_3^- + 5 \text{Br}^- + 6 \text{H}^+ \rightarrow 3 \text{Br}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$

Határozza meg az alábbi kísérleti adatokból

- a) a reakció rendjét az egyes reaktánsokra (3 pont)  
 b) a reakció bruttó rendjét (2 pont)  
 c) a reakciósebességi együttható értékét (5 pont)

|   | $[\text{BrO}_3^-] \text{ (M)}$ | $[\text{Br}^-] \text{ (M)}$ | $[\text{H}^+] \text{ (M)}$ | rate (M/s)           |
|---|--------------------------------|-----------------------------|----------------------------|----------------------|
| 1 | 0,10                           | 0,10                        | 0,10                       | $8,0 \times 10^{-4}$ |
| 2 | 0,20                           | 0,10                        | 0,10                       | $1,6 \times 10^{-3}$ |
| 3 | 0,20                           | 0,20                        | 0,10                       | $3,2 \times 10^{-3}$ |
| 4 | 0,10                           | 0,10                        | 0,20                       | $3,2 \times 10^{-3}$ |

3. Egy izotóp felezési ideje 4,55 perc. Az eredeti izotóptömeg hány százaléka marad meg 2,00 óra elteltével? (10 perc)

4. Az  $\text{NO}_2$  és az elemi fluor között reakció bruttó egyenlete:  $2 \text{NO}_2 + \text{F}_2 = 2 \text{NO}_2\text{F}$

A reakció mechanizmusa a következő:

1.  $\text{NO}_2 + \text{F}_2 = \text{NO}_2\text{F} + \text{F}$  (lassú)  $k_1$   
 2.  $\text{NO}_2 + \text{F} = \text{NO}_2\text{F}$  (gyors)  $k_2$

A bruttó reakcióegyenletet tekintve, írja fel a kapcsolatot a reakció sebessége és az egyes anyagok koncentrációváltozási sebessége között! (4 pont)

Hogyan függ az  $\text{NO}_2\text{F}$  koncentrációváltozási sebessége az reaktánsok koncentrációjától? (6 pont)



$$\frac{d[\text{NO}_2]}{dt} = -2v$$

$$\frac{d[\text{F}_2]}{dt} = -v$$

$$\frac{d[\text{NO}_2\text{F}]}{dt} = 2v$$

b.)  $\frac{d[\text{NO}_2\text{F}]}{dt} = 2k_1[\text{NO}_2][\text{F}_2]$  egyenlőség:

ez a sebességmeghatározó lépés

$\frac{d[\text{NO}_2\text{F}]}{dt} = k_1[\text{NO}_2][\text{F}_2] + k_2[\text{NO}_2][\text{F}]$  (folytatás a másik lépéssel)

③  $\tau_{1/2} = 4,55$  perc

elsőrendű reakció

$$\tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

$$k = \frac{\ln 2}{\tau_{1/2}} = 0,152 \frac{1}{\text{perc}}$$

$t = 2 \text{ óra} = 120 \text{ perc}$

$$\frac{C}{C_0} = e^{-kt} = e^{-0,152 \cdot 120} = 1,150 \cdot 10^{-8}$$

$\sim \underline{\underline{1,15}} \cdot 10^{-6} \% \text{ marad két óra elteltével az}$   
 $\text{izotópból.}$

② a.) Az ① és ②-t összehasonlítva:  $\left. \begin{aligned} [\text{BrO}_3^-]_{\text{②}} &= 2 \cdot [\text{BrO}_3^-]_{\text{①}} \\ v_{\text{②}} &= 2 \cdot v_{\text{①}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \alpha = 1$

$$v = k [\text{BrO}_3^-]^\alpha [\text{Br}^-]^\beta [\text{H}^+]^\gamma$$

A ② és ③ összehasonlításából:  $\left. \begin{aligned} [\text{Br}^-]_{\text{③}} &= 2 \cdot [\text{Br}^-]_{\text{②}} \\ v_{\text{③}} &= 2 \cdot v_{\text{②}} \end{aligned} \right\} \beta = 1$

A ① és ④ összehasonlításából:  $\left. \begin{aligned} [\text{H}^+]_{\text{④}} &= 2 \cdot [\text{H}^+]_{\text{①}} \\ v_{\text{④}} &= 4 v_{\text{①}} \end{aligned} \right\} \gamma = 2$

|                      |                                 |
|----------------------|---------------------------------|
| $\text{BrO}_3^-$ -ra | elsőrendű                       |
| $\text{Br}^-$ -ra    | elsőrendű                       |
| $\text{H}^+$ -ra     | <del>elsőrendű</del> másodrendű |

b.) A reakció ~~negyed~~ negyedrendű a reakció.  
 $\alpha + \beta + \gamma = 1 + 1 + 2 = 4$

c.) reakciósebességi egyenlet

①  $v = 8,0 \cdot 10^{-4} \frac{\text{M}}{\text{s}}$   
 $\left. \begin{aligned} [\text{BrO}_3^-] &= 0,1 \text{ M} \\ [\text{Br}^-] &= 0,1 \text{ M} \\ [\text{H}^+] &= 0,1 \text{ M} \end{aligned} \right\}$

$$k = \frac{v}{[\text{BrO}_3^-][\text{Br}^-][\text{H}^+]^2} = \frac{8,0 \cdot 10^{-4} \text{ M/s}}{0,1 \text{ M} \cdot 0,1 \text{ M} \cdot 0,1^2 \text{ M}^2} = 8,00 \frac{1}{\text{M}^3 \text{ s}}$$

$$k = \frac{8,0 \cdot 10^{-4} \text{ M/s}}{0,1 \text{ M} \cdot 0,1 \text{ M} \cdot 0,1^2 \text{ M}^2} = 8,00 \frac{1}{\text{M}^3 \text{ s}}$$

④  $k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$

| T/K    | k / $\frac{1}{\text{s}}$ |
|--------|--------------------------|
| 268,15 | $3,46 \cdot 10^{-5}$     |
| 298,15 | $8,87 \cdot 10^{-5}$     |

$R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}}$

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$

1. folytatás

$$\textcircled{I} \quad \ln k_1 = \ln A - \frac{E_a}{RT_1} \rightarrow -10,272 = \ln A - 4,4855 \cdot 10^4 E_a$$

$$\textcircled{II} \quad \ln k_2 = \ln A - \frac{E_a}{RT_2} \rightarrow -4,725 = \ln A - 4,0342 \cdot 10^4 E_a$$

$\textcircled{II} - \textcircled{I}$

$$5,547 = 4,513 \cdot 10^5 E_a$$

$$E_a = \underline{\underline{122,9 \text{ kJ/mol}}}$$

$$\left. \begin{array}{l} \ln k_2 - \ln k_1 \\ -\frac{1}{RT_2} + \frac{1}{RT_1} \end{array} \right\} \rightarrow \text{az eredeti n\u00e1m\u00f3val} \\ \text{m\u00e1r\u00edt\u00e1s z\u00f3r\u00e9su nem} \\ \text{kerek\u00edtve:}$$

$$E_a = \underline{\underline{123,3 \text{ kJ/mol}}}$$

QSSA - \u00e1r\u00e9l\u00e9k\u00e9s

4. b

$$\frac{d[F]}{dt} = k_1 [NO_2][F_2] - k_2 [NO_2][F] = 0$$

$$[F] = \frac{k_1 [F_2]}{k_2} = \frac{k_1}{k_2} [F_2]$$

$$\frac{d[NO_2F]}{dt} = k_1 [NO_2][F_2] + k_2 [NO_2] \frac{k_1}{k_2} [F_2] = \underline{\underline{2 k_1 [NO_2][F_2]}}$$

~~Itt \u00f3sszeg m\u00e1sodik tagja elhanyagolható, \u00e9s \u00e9szen~~  
~~a nagyon gyors reakci\u00f3b\u00f3l \u00e1r\u00e9l\u00e9k\u00e9s~~

A \u00e9lel\u00e9z\u0151 F - atomok a reakci\u00f3sebess\u00e9gek  
\u00e9rt\u00e9keinek k\u00f6sz\u00f6nhet\u00e9n szinte n\u00f3gyn t\u00f3v\u00e9bb-  
\u00e1ll\u00e9nak NO<sub>2</sub>F - \u00e9.