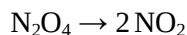


1. feladat**/ 10 pont**

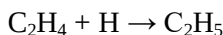
Az alábbi unimolekulás bomlási reakciót vizsgáljuk:



A reakció sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggése 300 K és 600 K között a kiterjesztett Arrhenius-egyenlettel adható meg $A = 4,05 \cdot 10^{18} \text{ s}^{-1}$, $n = -1,10$, $E = 53,71 \text{ kJ mol}^{-1}$ paraméterekkel. Mekkora a reakció aktiválási entalpiája és aktiválási entrópiája a 300 K-en és a 400 K-en számított sebességi együtthatók alapján, ha feltételezzük, hogy az aktiválási paraméterek hőmérsékletfüggetlenek a vizsgált tartományban?

2. feladat**/ 10 pont**

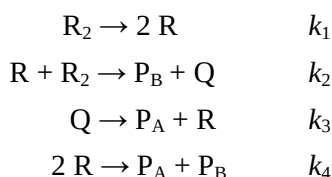
Etilgyökök képződését vizsgáljuk az alábbi bimolekulás reakció szerint:



A reakció sebességi együtthatójának nyomásfüggése a Lindemann-moddal becsülhető. A reakció bimolekulás sebességi együtthatója 800 K-en a végtelen nyomásra extrapolált sebességi együttható 40%-a egy adott nyomáson. Hányszorosára nő a bimolekulás sebességi együttható értéke ugyanezen a hőmérsékleten, ha a nyomást a kétszeresére növeljük?

$$A_0 = 4,60 \cdot 10^{19} \text{ cm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}, n_0 = 0, E_0 = 4,48 \text{ kJ mol}^{-1}$$

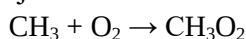
$$A_\infty = 1,77 \cdot 10^{14} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}, n_\infty = 0, E_\infty = 8,83 \text{ kJ mol}^{-1}$$

3. feladat**/ 10+6 pont**Egy R_2 szénhidrogén termikus bomlása az alábbi elemi reakciókat tartalmazó mechanizmus szerint megy végbe:

amelyben R_2 , P_A és P_B stabil szénhidrogének, R és Q pedig szabad gyökök, amelyek időbeli koncentrációváltozására alkalmazható a kvázistacionárius közelítés.

a) Határozzuk meg P_B keletkezési sebességét úgy, hogy az ne tartalmazza a szabad gyökök koncentrációit!b) Határozzuk meg Q kvázistacionárius koncentrációját úgy, hogy az ne tartalmazza a szabad gyökök koncentrációit!**Szorgalmi feladat****/ 10* pont**

A következő bimolekulás reakció nyomásfüggése jól közelíthető a Lindemann-moddal:



Egy mérésorozat alapján 5,00 atm nyomáson és egy ismeretlen, állandó hőmérsékleten a reakció bimolekulás sebességi együtthatója a végtelen nyomásra extrapolált sebességi együttható 56,6%-a. Mekkora hőmérsékleten végeztük a méréseket, ha ismertek a 0 és végtelen nyomásra extrapolált sebességi együtthatók hőmérsékletfüggését leíró kiterjesztett Arrhenius-paraméterek?

$$A_0 = 6,85 \cdot 10^{24} \text{ cm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}, n_0 = -3,00, E_0 = 0 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$A_\infty = 7,81 \cdot 10^9 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}, n_\infty = 0,90, E_\infty = 0 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$c_{A,t} = c_{A,0} \cdot \exp(-kt) \quad \frac{1}{c} = \frac{1}{c_0} + kt \quad \frac{dc}{dt} = k \prod_i c_i^{n_i} \quad k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad k = A \cdot T^n \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

$$k_{uni/bi} = k_\infty \left(\frac{P_r}{P_r + 1} \right) \quad P_r = \frac{k_0[M]}{k_\infty} \quad k = \left(\frac{k_B T}{h} \right) \frac{Q^\ddagger}{Q_A} \exp\left(-\frac{\Delta E_0^\ddagger}{RT}\right) \quad k = \left(\frac{k_B T}{h} \right) \exp\left(-\frac{\Delta_r H^\ddagger}{RT}\right) \exp\left(\frac{\Delta_r S^\ddagger}{R}\right)$$

$$k = \left(\frac{k_B T}{h} \right) \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\ddagger}{RT}\right) \quad N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}, R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}, k_B = 1,381 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}, h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$