

1. Feladat**/ 10 pont**

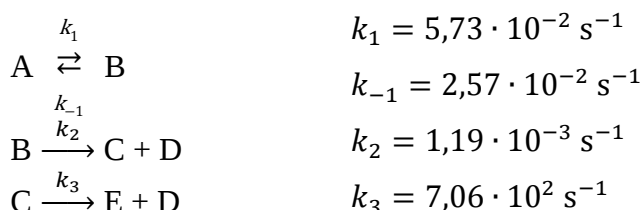
Egy unimolekulás reakció aktiválási paramétereit vizsgáltuk. Azt tapasztaltuk, hogy a hőmérsékletet 1420 K-ről 1670 K-re növelve a reakció sebességi együtthatója a 3,76-szorosára növekedett. A vizsgálataink során kimutattuk továbbá, hogy ezen a hőmérséklettartományon a reakció aktiválási entalpiája hőmérséklet-független, de az aktiválási entrópiája hőmérsékletfüggést mutat, és az alábbi empirikus összefüggéssel lehet közelíteni az értékét:

$$\Delta_r S^\ddagger(T) / (\text{J}/(\text{mol K})) = 8,079 \cdot 10^{-3} \cdot (T / \text{K}) - 34,20$$

Mekkora a reakció aktiválási entalpiája a vizsgált hőmérséklettartományban?

2. Feladat**/ 12 pont**

Tekintsük a következő összetett reakciómechanizmust:

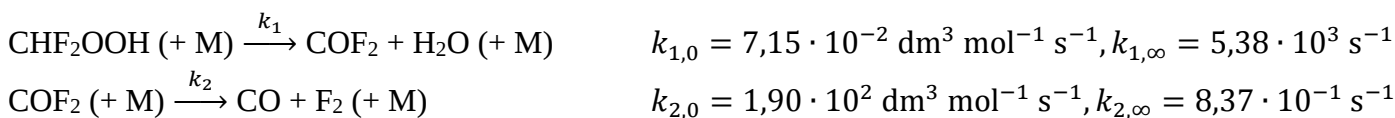


a) Írd fel a reakciómechanizmus alapján a kinetikai differenciálegyenlet-rendszert!

b) A reakció kezdete után kis idő elteltével a B anyagra már kvázistacionárius közelítést alkalmazhatunk. Ebben a nullának választott időpillanatban az A anyag koncentrációja $0,0240 \text{ mol/dm}^3$. Mekkora lesz az A anyag koncentrációja a nulla időpillanat után egy perc elteltével?

3. Feladat**/ 16 pont**

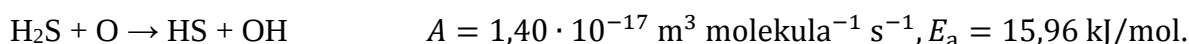
A CHF_2OOH molekula 1400 K hőmérsékleten két unimolekulás reakcióból álló mechanizmus szerint bomlik. Mindkét reakció sebességi együtthatója nyomásfüggést mutat, amelyek leírhatók a Lindemann-modell keretein belül, a következő paraméterek szerint:



Írd fel a F_2 termelődésének sebességi egyenletét 10^{-1} bar és 10^6 bar nyomáson, azaz fejezd ki, hogy a termelődés sebessége az adott nyomáson mely anyagfajta koncentrációjától hogyan függ, és számítsd ki mindkét nyomáson az adott sebességi egyenletben szereplő sebességi együttható értékét!

4. Feladat**/ 10 pont**

Az alábbi elemi reakció sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggését a 290 K – 500 K hőmérséklettartományban leírhatjuk az egyszerű Arrhenius-egyenlettel, a következő paraméterek szerint:



A reakció szabadentalpiája a vizsgált hőmérséklettartományban $\Delta_r G = -53,93 \text{ kJ/mol}$. Javasolj Arrhenius-paramétereket a $\text{HS} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{S} + \text{O}$ reakció sebességi együtthatója hőmérsékletfüggésének leírására, ha ez esetben is alkalmazható az egyszerű Arrhenius-egyenlet!

$$\begin{array}{llll} c_t^{1-n} = c_0^{1-n} + (n-1)kt & c_t = c_0 \cdot \exp(-kt) & c_t^{-1} = c_0^{-1} + kt & \frac{d[A_j]}{dt} = \sum_i \nu_{ij} k_i \prod_j [A_j]^{\nu_{ij}} \quad k = A e^{-\frac{E_a}{RT}} \\ k_{\text{uni}} = k^\ddagger K^\ddagger = \frac{k_B T}{h} \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\ddagger}{RT}\right) & k_{\text{bi}} = \frac{k_B T}{h} \frac{k_B T}{p^\theta} \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\ddagger}{RT}\right) & k_{\text{uni}} = \frac{k_B T}{h} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta_r H^\ddagger}{RT}\right) \cdot \exp\left(\frac{\Delta_r S^\ddagger}{R}\right) \\ k_{\text{uni}} = k_\infty \left(\frac{p_r}{p_r+1}\right) & P_r = \frac{k_0[M]}{k_\infty} & [M] = \frac{p}{RT} & h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \quad k_B = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \quad p^\theta = 101325 \text{ Pa} \end{array}$$