

Gyakorló feladatok a reakciókinetika témaköréhez

A következő feladatgyűjtemény a Fizikai kémia 2 – Reakciókinetika tantárgy tematikájához igazodik. Az itt szereplő feladatok egy része az órán feladott példák és a házi feladatok, de vannak közöttük gyakorló feladatok is, illetve a feladatok egy része az előző évek óráihoz készült, amelyeket ezúton szeretnék megköszönni Varga Tamásnak és Samu Viktornak. A feladatgyűjtemény arra hivatott, hogy segítséget nyújtson a tantárgy követelményeinek megértéséhez, begyakorlásához és elmélyítéséhez, használja az ember akár ZH felkészüléshez, akár a reakciókinetika iránt való érdeklődésből. A jegyzet jelenleg készülő félben van, folyamatosan frissítem, aktualizálom, a lehetőségekhez mérten a gyakorlatokkal összhangban. Sikeres feladatmegoldást kívánok!

Kovács Márton
2017. szeptember 21.

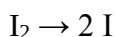
Feladatok

1. Feladat

- Számítsuk ki az A és B molekulák közötti ütközések számát, ha mind az A, mind a B molekula parciális nyomása 100 torr 300 K hőmérsékleten, az A molekula átmérője 0,3 nm, a B molekuláé 0,4 nm, a részecskék átlagos sebessége pedig $5 \cdot 10^2$ m/s ezen a hőmérsékleten.
- A ütközések hányad része történik elegendő energiával ahhoz, hogy végbemenjen a reakció az adott hőmérsékleten, ha az aktiválási energia 40 kJ/mol?
- Határozzuk meg a reakció sebességi együtthatóját!

2. Feladat

Határozzuk meg a



reakció sebességi együtthatóját 300 K hőmérsékleten és 1 bar nyomáson, amennyiben ismert a I_2 -molekula rezgési frekvencia hullámszámban $\tilde{\nu} = 213,54 \text{ cm}^{-1}$ és forgási állandója $B = 0,0373 \text{ cm}^{-1}$, az átmeneti állapot forgási állandója $B = 0,0364 \text{ cm}^{-1}$ és a reaktáns és az átmeneti állapot közötti energiakülönbség 0 K-en $\Delta_r E_0^\ddagger = 205 \text{ kJ/mol}$.

3. Feladat

- Számítsd ki a $\text{H}_2 \rightarrow 2 \text{H}$ reakció sebességi együtthatóját az átmenetiállapot-elmélet szerint 1300 K hőmérsékleten, az alábbiak ismeretében: $B_{\text{H}_2} = 60,853 \text{ cm}^{-1}$, a bomlási hullámszám $\tilde{\nu} = 4401,2 \text{ cm}^{-1}$, $B_{\text{H}_2^\ddagger} = 60,805 \text{ cm}^{-1}$, $\Delta_r E_0^\ddagger = 335,8 \text{ kJ/mol}$.
- Számítsd ki a fordított irányú (bimolekulás) reakció sebességi együtthatóját is 1 dm³ térfogatban, ha a rekombinációs reakcióban a reaktánsok és az átmeneti állapot közötti zérusponthoz viszonyított energia 0.

4. Feladat

Számold ki a $\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2 \text{ OH}$ reakció egyensúlyi állandóját 1000 K hőmérsékleten! A számoláshoz az alábbi forgási és rezgési állandókat (cm^{-1} mértékegységben), illetve 0 K-en számolt képződési energiákat használd (hartree mértékegységben)!

$$\begin{array}{lll} B_{\text{H}_2} = 60,679 \text{ cm}^{-1} & B_{\text{O}_2} = 1,3433 \text{ cm}^{-1} & B_{\text{OH}} = 18,823 \text{ cm}^{-1} \\ \tilde{\nu}_{\text{H}_2} = 4470,7 \text{ cm}^{-1} & \tilde{\nu}_{\text{O}_2} = 2011,8 \text{ cm}^{-1} & \tilde{\nu}_{\text{OH}} = 4010,1 \text{ cm}^{-1} \\ \Delta E_{0,\text{H}_2} = -1,1680 E_{\text{h}} & \Delta E_{0,\text{O}_2} = -150,16 E_{\text{h}} & \Delta E_{0,\text{OH}} = -75,649 E_{\text{h}} \end{array}$$

5. Feladat

Milyen és mennyi molekuláris paraméter ismeretére lenne szükség a $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{ OH}$ reakció sebességi együtthatójának meghatározásához az átmeneti állapot elmélet alapján?

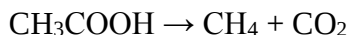
6. Feladat

a) A ^{235}Pa izotóp felezési ideje 26 perc. Egy $32,5 \text{ mmol/dm}^3$ koncentrációjú $^{235}\text{PaCl}_2$ oldatnak mennyi lesz a koncentrációja 3 óra múlva?

b) Mennyi idő alatt csökken a koncentráció a kezdeti érték 1%-ára?

7. Feladat

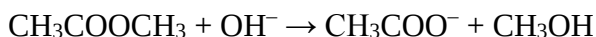
Az ecetsav 1000 °C-on a következő egyenlet szerint bomlik:



Számítsuk ki a reakció sebességi együtthatóját, ha a kezdetben csak ecetsavat tartalmazó zárt tartályban a nyomás 0,0127 s alatt másfélszeresére növekedett! (Tételezzük fel, hogy a hőmérséklet állandó, és a sebességi együttható nem változik a körülményekkel!)

8. Feladat

Metil-acetát lúgos hidrolízisét végezzük, amely jó közelítéssel másodrendű kinetika szerint játszódik le:

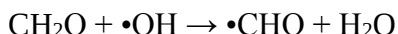


a) Mindkét reaktáns kezdeti koncentrációja $0,05 \text{ mol/dm}^3$, a sebességi együttható $0,599 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Mennyi idő alatt játszódik le a reakció? (Tekintsük a reakciót lejátszódottnak, ha a MeOAc koncentrációja eléri a kezdeti érték 2%-át!)

b) Mennyivel növeljük a kezdeti koncentrációkat (egyenlő mértékben), ha 10 perccel rövidebb reakcióidőt szeretnénk?

9. Feladat

A formaldehid és a OH-gyökök között a következő elemi reakció játszódik le:



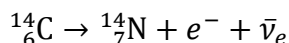
amelyhez az OH-gyökök fotolízis segítségével állíthatóak elő. A két reaktáns koncentrációja a mérés kezdetén:

$$\begin{aligned} c_0(\text{CH}_2\text{O}) &= 5,014 \cdot 10^{15} \text{ molekula cm}^{-3}, \\ c_0(\text{OH}) &= 3,99 \cdot 10^{10} \text{ molekula cm}^{-3}. \end{aligned}$$

A mérés alapján meghatározva az OH-gyökök felezési ideje 6,957 μs . Mennyi a felírt másodrendű reakció sebességi együtthatója?

10. Feladat

Régészeti leletek kormeghatározására alkalmazott módszer az úgynevezett radiokarbon kormeghatározás. A módszer lényege, hogy a szén természetes ^{14}C izotópja nem stabil, radioaktív béta-bomlással 5730 éves felezési idővel bomlik. A bomlás egyenlete a következő:



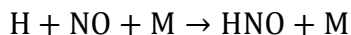
A kormeghatározást az teszi lehetővé, hogy ismert az élő szervezetben a ^{14}C izotóp egyensúlyi aránya, ez $^{14}\text{C}/^{12}\text{C} = 1,325 \cdot 10^{-12}$.

a) Egy csontváz leletet megvizsgálva azt találták, hogy benne ez az arány már lecsökkent $1,418 \cdot 10^{-14}$ -re. Milyen idős ez a lelet? Melyik régészeti korszakból származik?

b) Mi a módszerrel meghatározható legrégebbi időpont, és mi a meghatározás pontossága éves skálán, ha a műszer kimutatási határa (a legkisebb koncentráció, amit még mérni lehet), és az ehhez tartozó hibahatár $(4,68 \pm 0,04) \cdot 10^7$ darab ^{14}C izotóp 1 g szénben?

11. Feladat

Nitrogén-oxid tartalmú hidrogénégési rendszerekben meghatározó jelentőségű a következő elemi reakció:



Itt az M az úgynevezett harmadik test ütköző, azaz gyakorlatilag bármilyen molekula a gáztérben. (Ezáltal M koncentrációja az összkoncentráció.)

Egy ilyen égési rendszert egy légköri nyomású, 780 °C-os reaktorban vizsgálva a mérés megkezdésekor a hidrogén atomok koncentrációja $4,69 \cdot 10^{10}$ részecske/ cm^3 , a nitrogén-monoxid koncentrációja $9,24 \cdot 10^8$ részecske/ cm^3 . Mekkora a fent leírt harmadrendű reakció sebességi együtthatója ezeken a körülményeken, ha a NO koncentráció 8 perc 42 másodperc alatt az 5%-ára csökkent, és feltételezzük, hogy csak ez a reakció fogyasztja a reaktánsokat?

12. Feladat

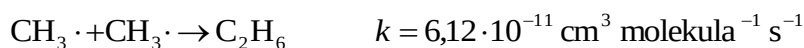
Dietil-éter savas hidrolízise során (90 °C, 1 M sósav), a következő koncentrációkat mérték:

t / min	$c / (\text{mmol dm}^{-3})$
0	0,8400
10	0,5558
20	0,3677

Mennyi a hidrolízis (pszeudo-elsőrendű) sebességi együtthatója?

13. Feladat

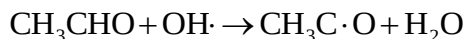
Etánt lézerny villanással fotolizáltak. A keletkező metil-gyökök a következő módon rekombinálnak szobahőmérsékleten:



Ha $4,48 \cdot 10^{19}$ molekula cm^{-3} koncentrációban keletkeztek metil gyökök, mennyi idő múlva csökken 100-adára a koncentrációjuk?

14. Feladat

Tekintsük a következő reakciót:



Az OH gyököket fotolízis segítségével hozzák létre, és azok koncentrációját lehet követni az időben. A kísérletekben az OH gyök fogyása elsőrendű volt, és a következő felezési időket mérték:

$$c_{\text{aldehid}} = 1,45 \cdot 10^{17} \text{ molekula cm}^{-3} \quad c_{\text{OH}} = 7,14 \cdot 10^{14} \text{ molekula cm}^{-3} \quad t_{1/2, \text{OH}} = 42,31 \mu\text{s}$$

$$c_{\text{aldehid}} = 5,22 \cdot 10^{17} \text{ molekula cm}^{-3} \quad c_{\text{OH}} = 5,67 \cdot 10^{14} \text{ molekula cm}^{-3} \quad t_{1/2, \text{OH}} = 11,75 \mu\text{s}$$

Mennyi a fenti reakció sebességi együtthatója?

15. Feladat

Gipszet ($\text{CaSO}_4 \cdot 2 \text{ H}_2\text{O}$) hevítve az vizet veszít és kalcium-szulfid hemihidrátta alakul ($\text{CaSO}_4 \cdot 0,5 \text{ H}_2\text{O}$). A reakció sebességi együtthatója 75 °C-on $0,233 \text{ min}^{-1}$. Mennyi idő alatt képződik 1,5 kg víz, 50 kg gipszből 75 °C-on? (Kizárólag a bomlási reakció játszódását feltételezve.)

16. Feladat

Egy edény ^{18}F -FDG molekulákat tartalmaz, amely egy, a PET-CT vizsgálatok során gyakran használt, radioaktív fluorizotóppal jelzett poliszacharid. A ^{18}F nuklid felezési ideje 110 perc. Mekkora a bomlási reakció sebességi együtthatója? Hányadrészére csökken a radioaktív nuklidok száma 24 óra alatt a kezdeti állapothoz képest?

17. Feladat

Ciklopropán prop-1-énné való átalakulását vizsgáljuk 500 °C-on, a reakció sebességi együtthatója $6,70 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Mennyi a reakció felezési ideje? Mennyi idő elteltével lesz a ciklopropán és a prop-1-én koncentrációaránya éppen 1:3, ha az 5 cm³ térfogatú tartályt a kísérlet elején standard állapotú ciklopropán gázzal töltöttük meg?

18. Feladat

A dimetil-éter elsőrendű kinetika szerinti termikus bomlását az alábbi egyenlet írja le:



A vizsgálatokhoz egy 10 dm³ térfogatú tartályt 50 mmol dimetil-éterrel és 10 mmol metánnal töltöttünk meg. A bomlási reakció sebességi együtthatója 777 K hőmérsékleten $4,34 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Hány mmol metánt tartalmaz a tartály 30 perc elteltével, ha feltételezzük, hogy kizárólag a dimetil-éter bomlási reakciója zajlik le a tartályban?

19. Feladat

Az alábbi, másodrendű kinetikát követő gázfázisú reakciót vizsgáljuk:



A mérés körülményei között mind a reaktánsok, mind a termék gáz halmazállapotú. A mérés kezdetén a tartályt sztöchiometrikus arányban töltjük meg az A és a B reaktánsal, az így kapott elegy nyomása kezdetben 600 torr 400 K hőmérsékleten. Mennyi a reakció mért sebességi együtthatója, ha tudjuk, hogy 2,5 óra elteltével a tartályban lévő nyomás 478 torr értékre csökken állandó körülmények között?

20. Feladat

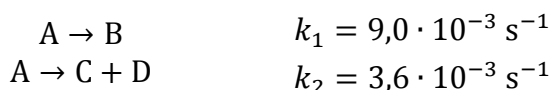
Határozzuk meg az $\text{A} + \text{B} + 2 \text{C} \rightarrow \text{P}$ reakció reaktánsaira vonatkozó részrendeket, a következő adatok ismeretében:

[A] / (mol dm ⁻³)	[B] / (mol dm ⁻³)	[C] / (mol dm ⁻³)	[P] / (mol dm ⁻³)	r / (μmol dm ⁻³ s ⁻¹)
0,5	0,8	0,2	0,0	2048
0,2	1,6	0,2	0,0	8192
0,3	0,7	0,3	0,8	2352
0,5	0,4	0,2	0,7	512

Mekkora a reakció sebességi együtthatója?

21. Feladat

Egy A anyagot hevítve B anyaghoz szeretnénk jutni, azonban egy mellékreakció is lejátszódik a főreakció mellett:

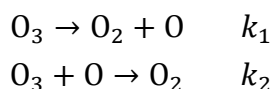


a) Mennyi a B és a C anyag aránya 60 s elteltével?

b) Mennyi a B anyag anyagmennyisége 2 perc elteltével, ha kezdetben 0,5 mol A anyagból indultunk ki?

22. Feladat

Adott az ózon bomlásának leegyszerűsített mechanizmusa:



Az oxigénatomra alkalmazva a QSSA-t fejezzük ki az ózon koncentrációjának időbeli változását, úgy, hogy abban ne szerepeljen az O koncentrációja!

23. Feladat

A $Cl_2 + CO \rightarrow COCl_2$ reakció sebességi együtthatójára a következő értékeket mérték az adott hőmérsékleten:

T / K	$k / (\text{dm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1})$
625	4,25
725	78,3

Határozzuk meg a reakció aktiválási energiáját, ha a sebességi együttható hőmérsékletfüggése leírható az Arrhenius egyenlettel!

24. Feladat

Az alábbi összetett reakciót vizsgáltuk:



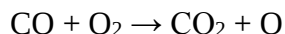
A reakció kezdeti sebességét megmértük négy különböző kezdeti reaktánskoncentráció esetén, a mérések eredményei az alábbi táblázatban láthatóak.

	$[A]_0 / \text{mol dm}^{-3}$	$[B]_0 / \text{mol dm}^{-3}$	$[C]_0 / \text{mol dm}^{-3}$	$r / 10^4 \text{ mol dm}^{-3} \text{s}^{-1}$
I	0,2	0,3	0,1	3,6
II	0,2	0,6	0,1	7,2
III	0,1	0,3	0,1	0,9
IV	0,2	0,6	0,3	7,2

Mennyi az egyes reaktánsok részrendje, illetve mennyi a vizsgált reakció sebességi együtthatója?

25. Feladat

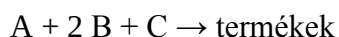
Az alábbi reakció sebességi együtthatóját vizsgáljuk:



A sebességi együttható értéke 600 K hőmérsékleten $1,37 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 700 K-en pedig $4,08 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Hogyan adható meg k hőmérsékletfüggése az Arrhenius-egyenlet alapján?

26. Feladat

Az alábbi összetett reakciót vizsgáltuk:



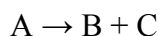
A reakció kezdeti sebességét megmértük hat különböző kezdeti reaktánskoncentráció esetén, a mérések eredményei az alábbi táblázatban láthatóak.

	$[\text{A}]_0 / \text{mol dm}^{-3}$	$[\text{B}]_0 / \text{mol dm}^{-3}$	$[\text{C}]_0 / \text{mol dm}^{-3}$	$r / \text{mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1}$
I.	0,19	0,32	0,72	$2,24 \cdot 10^{-2}$
II.	0,29	0,44	0,68	$8,18 \cdot 10^{-2}$
III.	0,24	0,32	0,72	$3,57 \cdot 10^{-2}$
IV.	0,19	0,44	0,48	$2,95 \cdot 10^{-2}$
V.	0,29	0,44	0,58	$7,55 \cdot 10^{-2}$
VI.	0,19	0,51	0,48	$3,68 \cdot 10^{-2}$

Mennyi az egyes reaktánsok részrendje, illetve mennyi a vizsgált reakció sebességi együtthatója?

27. Feladat

a) Adott az alábbi, elsőrendű kinetikát követő oldatfázisú reakció:



A reaktáns kezdeti koncentrációja $0,200 \text{ mol dm}^{-3}$, amely 5,72 s alatt csökken a felére az $50,0^\circ \text{C}$ -on termosztált reakcióedényben. Milyen formában írható fel a reakció sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggése az Arrhenius-egyenlet alapján a mérés hőmérsékletének környezetében, ha a reakció aktiválási energiája ebben a hőmérséklettartományban $42,7 \text{ kJ mol}^{-1}$, tehát mennyi a felírható Arrhenius-egyenletben a preexponenciális együttható?

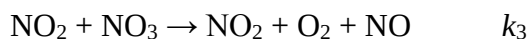
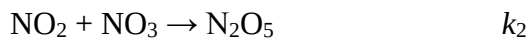
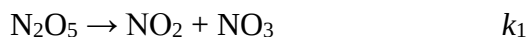
b) Adott az alábbi, másodrendű kinetikát követő oldatfázisú reakció:



A reaktánsok kezdeti koncentrációja $0,200 \text{ mol dm}^{-3}$, amely 5,72 s alatt csökken a felére az $50,0^\circ \text{C}$ -on termosztált reakcióedényben. Milyen formában írható fel a reakció sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggése az Arrhenius-egyenlet alapján a mérés hőmérsékletének környezetében, ha a reakció aktiválási energiája ebben a hőmérséklettartományban $42,7 \text{ kJ mol}^{-1}$, tehát mennyi a felírható Arrhenius-egyenletben a preexponenciális együttható?

28. Feladat

A N_2O_5 bomlása az alábbi néglépéses reakciómechanizmussal írható le:



Fejezd ki a NO és a NO_3 közttermékek koncentrációját a kvázistacionárius közelítés felhasználásával úgy, hogy azok kizárólag a sebességi együtthatókat és a stabil anyagok koncentrációit tartalmazzák!

29. Feladat

Mennyi egy reakció aktiválási energiája, ha 30°C és 50°C között megduplázódik a sebességi együtthatója?

30. Feladat

Egy reakció sebességi együtthatója $3,00 \cdot 10^{11} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 500 K-en, és $8,33 \cdot 10^{13} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 800 K-en. Számítsa ki a sebességi együttható Arrhenius paramétereit!

31. Feladat

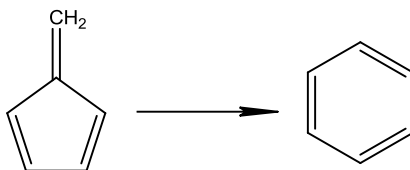
A NO_2 és fluor reakcióját a következő, elemi reakciókat tartalmazó mechanizmussal lehet leírni, magas nyomáson, 500 K hőmérsékleten:



Mennyi a fluor atomok kvázistacionárius koncentrációja, ha $[\text{NO}_2] = 2,80 \text{ mmol/dm}^3$ és $[\text{F}_2] = 0,50 \text{ mmol/dm}^3$?

32. Feladat

A fulvén magas hőmérsékleten benzollá izomerizálódik:



Két különböző hőmérsékleten mérték a két anyagfajta koncentrációjának időbeli változását és a reakció sebességét. A mérési eredményeket az alábbi táblázat tartalmazza.

- Határozzuk meg az izomerizációs reakció rendjét!
- Számítsuk ki a reakció aktiválási energiáját és a preexponenciális tényezőt!
- Mekkora a fulvén és a benzol koncentrációja 1100 K-en, a reakció kezdete után 0,4 s elteltével, ha a kiindulási fulvén koncentráció ez esetben $0,015 \text{ mol dm}^{-3}$?

A fulvén izomerizációs reakciójának mérési eredményei ([F]: [fulvén], [B]: [benzol], Mértékegységek: [F], [B]: mol dm^{-3} , r : $\text{mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1}$)

	1000 K			1200 K		
t / s	[F]	[B]	r	[F]	[B]	r
0,0	$1,00 \cdot 10^{-2}$	0,00	$2,76 \cdot 10^{-2}$	$2,00 \cdot 10^{-2}$	0,00	$1,36 \cdot 10^1$
0,1	$7,84 \cdot 10^{-3}$	$2,16 \cdot 10^{-3}$	$1,70 \cdot 10^{-2}$	$2,90 \cdot 10^{-4}$	$1,97 \cdot 10^{-2}$	$2,86 \cdot 10^{-3}$
0,2	$6,44 \cdot 10^{-3}$	$3,56 \cdot 10^{-3}$	$1,15 \cdot 10^{-2}$	$1,46 \cdot 10^{-4}$	$1,99 \cdot 10^{-2}$	$7,26 \cdot 10^{-4}$
0,5	$4,20 \cdot 10^{-3}$	$5,80 \cdot 10^{-3}$	$4,87 \cdot 10^{-3}$	$5,87 \cdot 10^{-5}$	$1,99 \cdot 10^{-2}$	$1,17 \cdot 10^{-4}$
1,0	$2,66 \cdot 10^{-3}$	$7,34 \cdot 10^{-3}$	$1,95 \cdot 10^{-3}$	$2,94 \cdot 10^{-5}$	$2,00 \cdot 10^{-2}$	$2,94 \cdot 10^{-5}$

33. Feladat

Tekintsük a következő másodrendű reakciókat:



Az alábbi koncentrációkat mérték az idő függvényében:

$t / \text{óra}$	[A] / mol dm^{-3}	[B] / mol dm^{-3}
0	1,150	0,000
5	0,859	0,259
10	0,685	0,402
15	0,570	0,501

Határozd meg a k_1 és k_2 értékét!

34. Feladat

Tekintsük a következő elsőrendű, gázfázisú reakciót:



Egy zárt tartályban, eleinte tiszta A gáz található, 2,75 bar nyomáson, 30 perc után a tartályban végbemenő reakció miatt már 4,13 bar nyomás van.

Határozd meg a fenti reakció sebességi együtthatóját!

35. Feladat

Tekintsük a következő harmadrendű reakciót, amelyben minden reaktáns részrendje 1:



A és B anyagok koncentrációját mérték két időpontban:

t / perc	$[A] / \text{mol dm}^{-3}$	$[B] / \mu\text{mol dm}^{-3}$
5	5,11	2,55
10	5,11	0,86

Határozd meg az $A + 2 B$ reakció sebességi együtthatóját!

36. Feladat

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

Mennyi a reakció rendje és sebességi együtthatója?

37. Feladat

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



$p = 0,88$ bar kezdeti nyomású tiszta DTBP-t zárt reaktorban, állandó hőmérsékleten tartunk. 95 perc elteltével a nyomás a reaktorban 1,33 bar, és nem volt megfigyelhető egyik anyag kondenzációja sem. Határozd meg a DTBP bomlásának sebességi együtthatóját!

38. Feladat

A $\text{HO}_2 + \text{H} = \text{OH} + \text{OH}$ reakció sebességi együtthatója 600 K-en $8,51 \cdot 10^{12} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$, illetve 850 K-en $4,77 \cdot 10^{13} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Feltéve, hogy a sebességi együttható hőmérsékletfüggése leírható az Arrhenius egyenlettel, határozza meg a reakció aktiválási energiáját, ebben a hőmérséklettartományban!

39. Feladat

Egy $\text{A} + \text{B}$ másodrendű reakció sebességi együtthatóját akarták meghatározni szoba-hőmérsékleten. Kevés állt rendelkezésre az A anyagból, továbbá az A anyag vízben lassan bomlik (egy elsőrendű folyamatban), de B anyag csak vízben oldható ezért a méréseket vízben kell végezni.

Nagy B felesleg mellett mérték az A anyag átlagos élettartamát vizes oldatban. A következő eredményeket kapták:

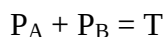
$$c_{\text{A},0} = 12,2 \mu\text{mol dm}^{-3} \quad c_{\text{B},0} = 0,885 \text{ mol dm}^{-3} \quad \tau_{\text{A}} = 45,5 \text{ min}$$

$$c_{\text{A},0} = 8,27 \mu\text{mol dm}^{-3} \quad c_{\text{B},0} = 1,97 \text{ mol dm}^{-3} \quad \tau_{\text{A}} = 33,9 \text{ min}$$

Mennyi az $\text{A} + \text{B}$ reakció sebességi együtthatója, illetve az A anyag vízbéli bomlásának sebességi együtthatója?

40. Feladat

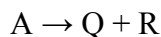
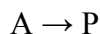
Tekintsük a következő háromlépéses reakciómechanizmust, amelyben minden reaktáns részrendje 1 (azaz, az $\text{A} + \text{A}$ reakció másodrendű).



A kvázi-stacionárius közelítés alkalmazásával a köztitermékekre, határozd meg a $2 \text{ A} + 2 \text{ B} = \text{T}$ reakció rendjét.

41. Feladat

Az alábbi oldatfázisú párhuzamos reakciókat vizsgáljuk:



Ha mindkét reakció játszódik az oldatban, akkor az A reaktáns koncentrációja éppen 76 perc alatt csökken az eredeti érték harmadára. Amennyiben azonban el tudjuk érni, hogy csak az első reakció játszódjon le, úgy ugyanennyi idő alatt csak a reaktáns 21,5%-a bomlik el. Mennyi a két reakció sebességi együtthatója?

42. Feladat

Adott a következő összetett reakció: $A \rightarrow 2 B$. Mekkora a B anyag koncentrációja a reakció kezdetétől számított 1 óra múlva, ha az A anyag koncentrációja kezdetben 35 mmol/dm^3 , és az A anyag felezési ideje 31,7 perc, ha a reakció rendje

- a) 0; b) 0,5; c) 1; d) 1,5; e) 2; f) 3?

43. Feladat

Metilgyökök rekombinációjának sebességi együtthatóját vizsgáljuk:



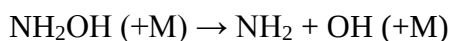
Mekkora a fenti bimolekulás reakció sebességi együtthatója a Lindemann-modell szerint 800 K hőmérsékleten és 5 kPa nyomáson, amennyiben ismertek a reakció 0 és végtelen nagy nyomásra extrapolált sebességi együtthatóinak a kiterjesztett Arrhenius-egyenlet alapján megadott paraméterei?

$$A_0 = 1,27 \cdot 10^{41} \text{ cm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}; \quad n_0 = -7,00; \quad E_0 = 2,76 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$A_\infty = 1,81 \cdot 10^{13} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}; \quad n_\infty = 0; \quad E_\infty = 0 \text{ kJ mol}^{-1}$$

44. Feladat

Tekintsük a következő nyomásfüggő unimolekulás reakciót:



a) Mekkora a reakció sebességi együtthatója 25 °C-on 1 bar nyomáson a Lindemann-modell alapján, ha a 0 és a végtelen nagy nyomásra extrapolált sebességi együtthatók a kibővített Arrhenius-egyenlet szerint a következő paraméterekkel írhatók le:

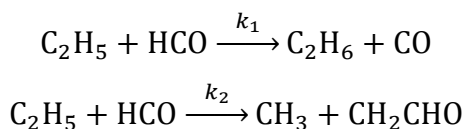
$$A_0 = 5,4 \cdot 10^{37} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}, \quad n_0 = -5,96, \quad E_0 = 3,36 \cdot 10^4 \text{ K}$$

$$A_\infty = 1,4 \cdot 10^{20} \text{ s}^{-1}, \quad n_\infty = -1,31, \quad E_\infty = 3,22 \cdot 10^4 \text{ K}$$

b) Milyen mértékben változik a sebességi együttható, ha a nyomást azonos körülmények között 0,5; 2; 11-szeresére változtatjuk?

45. Feladat

Egy reaktorban 2500 K hőmérsékleten az etil- és a formilgyökök között lejátszódó reakció nyomásfüggését vizsgálták. A tapasztalat azt mutatta, hogy az adott gyökök két reakcióúton is reagálnak egymással:



Az első reakció nem mutatott nyomásfüggést, $k_1 = 4,30 \cdot 10^{10} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ adódott a sebességi együttható értékére. A második reakció nyomásfüggést mutatott, a 0 és a végtelen nagy nyomásra extrapolált sebességi együtthatóra $k_0 = 1,77 \cdot 10^{13} \text{ dm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}$, valamint $k_\infty = 2,55 \cdot 10^{10} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ értékek adódtak.

a) Mekkora az etilgyök koncentrációja 1 μs elteltével 50 atm nyomáson, ha a nullának választott időpillanatban az etil- és a formilgyök sztöchiometrikus elegye a teljes gáztér 1 %-át töltötte ki?

b) Milyen arányban van ekkor az etán és a metilgyök?

(A feladat megoldása során tegyük fel, hogy a vizsgált időintervallumban a fenti anyagfajták csak ebben a két reakcióban vesznek részt!)

46. Feladat

Az előző feladatban az etil- és a formilgyök reakciója esetén a reakció nyomásfüggését a Lindemann-modell keretein belül írtuk le. A gyakorlatban azonban sokszor előfordul, hogy a nyomásfüggést nem lehet leírni ezzel a modellel, ahogy valójában ebben az esetben sem. További módszereket dolgoztak ki a nyomásfüggés leírására, gyakori megadási mód például az úgynevezett „PLOG” módszer. Ennek során a hőmérséklet- és nyomásfüggés együttes leírására különböző nyomásokon megadják a kibővített Arrhenius egyenlet paramétereit.

Ez a $\text{C}_2\text{H}_5 + \text{HCO} \xrightarrow{k_2} \text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{CHO}$ reakció esetén a következőképp néz ki:

p / atm	$A / (\text{dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1})$	n	$E / (\text{kJ mol}^{-1})$
$1,000 \cdot 10^{-03}$	$9,200 \cdot 10^{+14}$	-1,299	10,48
$1,000 \cdot 10^{-02}$	$1,100 \cdot 10^{+15}$	-1,321	10,75
$1,000 \cdot 10^{-01}$	$5,700 \cdot 10^{+15}$	-1,518	13,33
$1,000 \cdot 10^{+00}$	$6,500 \cdot 10^{+18}$	-2,352	25,20
$1,000 \cdot 10^{+01}$	$1,900 \cdot 10^{+22}$	-3,249	44,27
$1,000 \cdot 10^{+02}$	$6,500 \cdot 10^{+19}$	-2,443	52,93

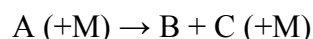
a) Válaszold meg az előző feladat kérdéseit ezen adatok alapján!

b) Mi lehet az oka, hogy erre a reakcióra nem alkalmazható a Lindemann-modell?

c) Bizonyítsd be, hogy nem alkalmazható a Lindemann-modell!

47. Feladat

Tekintsük a következő unimolekulás nyomásfüggő sebességi együtthatóval rendelkező reakciót:



A reakció sebességi együtthatóját a nyomás függvényében mérve 1150 K-en az alábbi eredményeket kapták:

p / bar	$k_{\text{uni}} / \text{s}^{-1}$
$1,00 \cdot 10^{-5}$	$4,30 \cdot 10^{-5}$
$1,00 \cdot 10^{-4}$	$4,30 \cdot 10^{-4}$
$1,00 \cdot 10^{-3}$	$4,30 \cdot 10^{-3}$
$1,00 \cdot 10^{-1}$	$4,29 \cdot 10^{-1}$
$1,00 \cdot 10^{+1}$	$3,31 \cdot 10^{+1}$
$1,00 \cdot 10^{+8}$	$1,44 \cdot 10^{+2}$
$1,00 \cdot 10^{+9}$	$1,44 \cdot 10^{+2}$

a) Határozzuk meg a 0 és végtelen nagy nyomásra extrapolált sebességi együtthatókat!

b) k_0 és k_{∞} ismertében határozzuk meg k_{uni} értékét 3 bar nyomáson!

48. Feladat

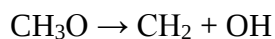
A következő bimolekulás reakció sebességi együtthatóját mértük 800 K hőmérsékleten, két különböző nyomáson:



Mekkora a reakció 0 és végtelen nagy nyomásra extrapolált sebességi együtthatója, ezen a hőmérsékleten, ha 2 bar nyomáson $k_{\text{bi}} = 1,063 \cdot 10^{10} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$, és 10 bar nyomáson $k_{\text{bi}} = 2,475 \cdot 10^{10} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$?

49. Feladat

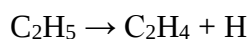
Az alábbi reakció nyomásfüggését vizsgáljuk, amely a Lindemann-modellel közelíthető:



A reakció végtelen nyomásra extrapolált sebességi együtthatója 700 K-en $4,29 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$. A nyomást 1 bar-ról 15 bar-ra növelve állandó hőmérsékleten az unimolekulás sebességi együttható 28%-kal nő. Mekkora a 0 nyomásra extrapolált sebességi együttható 700 K-en?

50. Feladat

Etilgyökök bomlási reakcióját vizsgáljuk:



A sebességi együtthatójának nyomásfüggése a Lindemann-modellel írható le. Megmértük a reakció unimolekulás sebességi együtthatóját 800 K-en két különböző nyomáson, amely 1 atm nyomáson $4,14 \cdot 10^{10} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 0,5 atm nyomáson $3,81 \cdot 10^{10} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ lett. Mekkora a reakció 0 és végtelen nagy nyomásra extrapolált sebességi együtthatója 800 K-en?

51. Feladat

Mekkora a $\text{H} + \text{O}_2 (+\text{M}) \rightarrow \text{HO}_2 (+\text{M})$ reakció sebességi együtthatója 1300 K-en, 4500 bar nyomáson, ha $k_0 = 1,737 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1,23}$ és $k_{\infty} = 4,650 \cdot 10^{12} \cdot T^{0,44}$?

(Mértékegységek: mol, cm³, s, K, J)

52. Feladat

- a) Mekkora a $\text{H}_2\text{O}_2 (+ \text{M}) \rightarrow 2 \text{OH} (+ \text{M})$ reakció sebességi együtthatója 1750 K-en, 3 bar nyomáson, ha $k_0 = 2,49 \cdot 10^{24} \cdot T^{-2,30} \cdot \exp\left(-\frac{48749}{RT}\right)$ és $k_\infty = 2,00 \cdot T^{0,90} \cdot \exp\left(-\frac{49749}{RT}\right)$?
(Mértékegységek: mol, cm³, s, K, J)
- b) Ezen a hőmérsékleten mekkora nyomáson lesz az unimolekulás bomlási együttható a magas nyomású határ 15%-a?

53. Feladat

A 31. 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 nyomásfüggést mutathatnak.

- a) Fejezd ki a fluor atomok kvázistacionárius koncentrációját, ha a k_3 nyomásfüggése a Lindemann-formalizmus alapján felírható.
- b) Számítsd ki a fluor atomok kvázistacionárius koncentrációját 0,50 atm nyomáson, ha a következőket tudjuk:
- A 31. Feladatban megadott k_2 és k_3 nyomásfüggése leírható a Lindemann-modell alapján.
 - A 31. Feladatban megadott k_2 és k_3 a magas nyomású határértékek.
 - A $\text{NO}_2 + \text{F} (+ \text{M}) \rightarrow \text{NO}_2\text{F} (+ \text{M})$ 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: $k_{3,p=0} = 1,22 \cdot 10^1 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$

54. Feladat

Egy unimolekulás reakció sebességi együtthatóját mérték 700 K és 800 K hőmérsékleten (sorrendben: k_1 , k_2):

$$k_1 = 722,0 \text{ s}^{-1}, k_2 = 9460 \text{ s}^{-1}.$$

Mekkora a reakció aktiválási entalpiája illetve entrópiája?

55. Feladat

Egy unimolekulás reakció sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggése 900 K – 1100 K között leírható a következő Arrhenius-paraméterekkel:

$$A = 4,880 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}, E_a = 91,31 \text{ kJ/mol}.$$

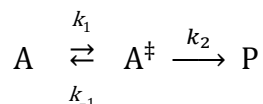
Számítsuk ki ez alapján az aktiválási entalpiát és entrópiát a 900 K – 1000 K, illetve az 1000 K – 1100 K hőmérséklet-tartományban, ha feltételezzük, hogy ezekben az intervallumokban az aktiválási paraméterek hőmérséklet-függetlenek!

56. Feladat

Mekkora annak az unimolekulás reakciónak az aktiválási entalpiája, melynek a sebességi együtthatója kétszeresére növekszik, ha a hőmérsékletet 600 K-ról 20 %-al növeljük?

57. Feladat

Az $A \rightarrow P$ reakció a következő mechanizmus szerint játszódik le:



A sebességi együtthatók értékei a következők:

$$k_1 = 4,76 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}, k_{-1} = 7,07 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}, k_2 = 3,79 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}.$$

Mekkora az $A \rightarrow P$ reakció aktiválási entalpiája 25 °C-on, ha $\Delta_r S^\ddagger = 29,3 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$?

58. Feladat

Határozd meg annak az unimolekulás reakciónak az aktiválási entalpiáját 35 °C-on, amely sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggése az összetett Arrhenius egyenlet szerint írható le, a következő paraméterekkel: $A = 2,771 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$, $n = -4,485$, $E = 87,34 \text{ kJ/mol}$!

A számoláshoz kiindulásul a sebességi együttható logaritmusának a hőmérséklet reciproka szerinti deriváltját tekintsd!

Megoldások

1. Feladat

$$a) \quad Z' = Z \cdot N_A N_B = \pi d^2 \cdot \bar{v} \cdot N_A N_B$$

$$d = 0,15 \text{ nm} + 0,20 \text{ nm} = 0,35 \text{ nm}$$

$$N_A = N_B = \frac{N}{V} = \frac{p}{k_B T} = \frac{13332 \text{ Pa}}{1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \cdot 300 \text{ K}} = 3,218 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$$

$$Z' = 3,142 \cdot (3,5 \cdot 10^{-10} \text{ m})^2 \cdot 500 \text{ m s}^{-1} \cdot (3,218 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3})^2$$

$$Z' = 1,993 \cdot 10^{33} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$$

$$b) \quad \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{40000 \text{ J/mol}}{8,314 \text{ J/mol K} \cdot 300 \text{ K}}\right) = 1,08 \cdot 10^{-7}$$

$$c) \quad k = \pi d^2 \cdot \bar{v} \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

$$k = 3,142 \cdot (3,5 \cdot 10^{-10} \text{ m})^2 \cdot 500 \text{ m s}^{-1} \cdot 1,084 \cdot 10^{-7}$$

$$k = 2,085 \cdot 10^{-23} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$$

2. Feladat

$$k = \frac{k_B T}{h} \left(\frac{q_{I_2^\ddagger}^\Theta}{q_{I_2}^\Theta} \right) \cdot e^{-\frac{\Delta_r E_0^\ddagger}{RT}} = \frac{k_B T}{h} \left(\frac{q_{I_2^\ddagger}^{\text{tr},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{tr},\Theta}} \cdot \frac{q_{I_2^\ddagger}^{\text{rot},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{rot},\Theta}} \cdot \frac{q_{I_2^\ddagger}^{\text{vib},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{vib},\Theta}} \cdot \frac{q_{I_2^\ddagger}^{\text{el},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{el},\Theta}} \right) \cdot e^{-\frac{\Delta_r E_0^\ddagger}{RT}}$$

$$q^{\text{trans}} = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \cdot V \quad \rightarrow \quad \frac{q_{I_2^\ddagger}^{\text{tr},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{tr},\Theta}} = \frac{m_{I_2^\ddagger}^{3/2}}{m_{I_2}^{3/2}} = 1$$

$$q^{\text{rot}} = \frac{k_B T}{h c B} \quad \rightarrow \quad \frac{q_{I_2^\ddagger}^{\text{rot},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{rot},\Theta}} = \frac{B_{I_2}}{B_{I_2^\ddagger}} = \frac{0,0373}{0,0364} = 1,025$$

$$\frac{q_{I_2^\ddagger}^{\text{vib},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{vib},\Theta}} = \frac{1}{1 - e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}} = \frac{1}{1,560} = 0,64 ; \quad \frac{q_{I_2^\ddagger}^{\text{el},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{el},\Theta}} = \frac{1}{1} = 1$$

$$k = \frac{k_B T}{h} \left(\frac{q_{I_2}^{\Theta}}{q_{I_2}^{\Theta}} \right) \cdot e^{-\frac{\Delta_r E_0^\ddagger}{RT}} = \frac{k_B T}{h} \left(\frac{q_{I_2}^{\text{tr},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{tr},\Theta}} \cdot \frac{q_{I_2}^{\text{rot},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{rot},\Theta}} \cdot \frac{q_{I_2}^{\text{vib},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{vib},\Theta}} \cdot \frac{q_{I_2}^{\text{el},\Theta}}{q_{I_2}^{\text{el},\Theta}} \right) \cdot e^{-\frac{\Delta_r E_0^\ddagger}{RT}}$$

$$= \frac{1,381 \cdot 10^{-23} \cdot 300}{6,626 \cdot 10^{-34}} (1 \cdot 1,025 \cdot 0,641 \cdot 1) \cdot \exp\left(-\frac{205000}{8,314 \cdot 300}\right) \text{ s}^{-1}$$

$$k = 8,292 \cdot 10^{-24} \text{ s}^{-1}$$

3. Feladat

a) $0,865 \text{ s}^{-1}$, b) $9,689 \cdot 10^9 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$

4. Feladat

$$K = \frac{q_{\text{OH}}^{\text{tr}}}{q_{\text{H}_2}^{\text{tr}} q_{\text{O}_2}^{\text{tr}}} \cdot \frac{q_{\text{OH}}^{\text{rot}}}{q_{\text{H}_2}^{\text{rot}} q_{\text{O}_2}^{\text{rot}}} \cdot \frac{q_{\text{OH}}^{\text{vib}}}{q_{\text{H}_2}^{\text{vib}} q_{\text{O}_2}^{\text{vib}}} \cdot \frac{q_{\text{OH}}^{\text{el}}}{q_{\text{H}_2}^{\text{el}} q_{\text{O}_2}^{\text{el}}} \cdot e^{-\frac{\Delta_r E_0}{RT}}$$

$$K = \frac{m_{\text{OH}}^3}{m_{\text{H}_2}^{3/2} m_{\text{O}_2}^{3/2}} \cdot \frac{4B_{\text{H}_2} B_{\text{O}_2}}{B_{\text{OH}}^2} \cdot \frac{\left(1 - e^{-\frac{h\tilde{\nu}_{\text{H}_2}c}{k_B T}}\right) \left(1 - e^{-\frac{h\tilde{\nu}_{\text{O}_2}c}{k_B T}}\right)}{\left(1 - e^{-\frac{h\tilde{\nu}_{\text{OH}}c}{k_B T}}\right)^2} \cdot 1 \cdot e^{-\frac{(2\Delta E_{0,\text{OH}} - \Delta E_{0,\text{H}_2} - \Delta E_{0,\text{O}_2})}{RT}}$$

$$K = 9,596 \cdot 0,920 \cdot 2,701 \cdot 1 \cdot 7,684 \cdot 10^{-5} = 1,832 \cdot 10^{-3}$$

5. Feladat

A megadott paramétereken kívül az átmeneti állapot szerkezete, ebből adódóan a molekula tömege, az összes rezgési frekvenciája (kivéve a reakciókoordináta menti bomlási frekvencia), három forgási állandója, és a zérus ponti képződési energiája (amelyből $\Delta_r E_0^\ddagger$ számítható)

6. Feladat

a) $t_{1/2} = 26 \text{ min} = 780 \text{ s}$

$t = 3 \text{ h} = 10800 \text{ s}$

$c_0 = 0,0325 \text{ mol/dm}^3$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} \rightarrow k = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} = \frac{0,6931}{780 \text{ s}} = 8,887 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$$

$$c(t) = c_0 \cdot e^{-kt}$$

$$c(10800 \text{ s}) = 0,0325 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \cdot e^{-8,887 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1} \cdot 10800 \text{ s}}$$

$$c(t) = 2,206 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3$$

$$\text{b) } c(t) = c_0 \cdot e^{-kt}$$

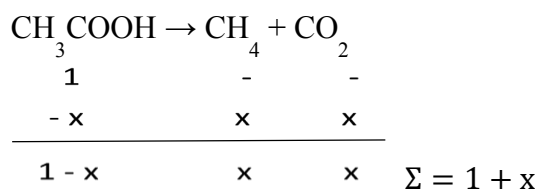
$$\frac{c(t)}{c_0} = 0,01 = e^{-kt} \rightarrow \ln 0,01 = -kt$$

$$t = \frac{\ln 0,01}{-k} = \frac{-4,605}{-8,887 \cdot 10^{-4}} \text{ s} = 5182 \text{ s}$$

$$t = 1 \text{ h } 26 \text{ min}$$

7. Feladat

Tegyük fel, hogy kiindulásban volt 1 mol ecetsav!



$$\frac{1+x}{1} = 1,5 \rightarrow x = 0,5$$

Ez tehát éppen a felezési idő ($t_{1/2} = 0,0127 \text{ s}$)

$$k = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} = \frac{0,6931}{0,0127 \text{ s}}$$

$$k = 54,58 \text{ s}^{-1}$$

8. Feladat

$$\text{a) } \frac{1}{c_A(t)} = \frac{1}{c_{A,0}} + kt \rightarrow t = \left(\frac{1}{c_A(t)} - \frac{1}{c_{A,0}} \right) / k$$

$$t = \left(\frac{1}{0,05 \cdot 0,02} - \frac{1}{0,05} \right) / 0,599 \text{ s} = 1636 \text{ s}$$

$$t = 27 \text{ min } 16 \text{ s}$$

$$\text{b) } t = 1636 \text{ s} - 600 \text{ s} = 1036 \text{ s}$$

$$\frac{1}{c_A(t)} = \frac{1}{0,02 \cdot c_{A,0}} = \frac{1}{c_{A,0}} + kt \rightarrow \left(\frac{1}{0,02} - 1 \right) \frac{1}{c_{A,0}} = kt$$

$$c_{A,0} = \frac{49}{kt} = \frac{49}{0,599 \cdot 1036} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} = 0,0790 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

9. Feladat

A reakció az OH-gyökre nézve pszeudo-elsőrendű:

$$\frac{dc(\text{OH})}{dt} \approx -k'c(\text{OH})$$

A felezési időből az elsőrendű reakció sebességi együtthatója számolható ki (k'):

$$k' = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} = \frac{0,6931}{6,957 \cdot 10^{-6}} \text{ s}^{-1} = 99626 \text{ s}^{-1}$$

$$k' = k \cdot c_{\text{B}} = k \cdot c_0(\text{CH}_2\text{O})$$

$$k = \frac{k'}{c_0(\text{CH}_2\text{O})} = \frac{99626}{5,014 \cdot 10^{15}} \frac{\text{cm}^3}{\text{molekula s}}$$

$$k = 1,987 \cdot 10^{-11} \frac{\text{cm}^3}{\text{molekula s}}$$

10. Feladat

a) A lelet kb. 37,5 ezer éves. (Őskőkorszak vagy paleolitikum)

b) A meghatározhatóság határa kb. 60 ezer év, pontossága kb. 70 év.

11. Feladat

$$k = 1,78 \cdot 10^{-32} \text{ cm}^6 \text{ molekula}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

12. Feladat

$$k' = 6,88 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$$

13. Feladat

$$t = 1,81 \cdot 10^{-8} \text{ s}$$

14. Feladat

$$k = 1,13 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ molekula}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

15. Feladat

$$t = 54,6 \text{ s}$$

16. Feladat

$$1,05 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}, 1,15 \cdot 10^{-4}$$

17. Feladat

$$1035 \text{ s}, 2069 \text{ s}$$

18. Feladat

$$c_{\text{CH}_4, t} = 37,1 \text{ mmol}$$

19. Feladat

$$k = 6,35 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

20. Feladat

$$\left(\frac{c_{\text{B},1}}{c_{\text{B},4}} \right)^{n_{\text{B}}} = \frac{2048}{512} \rightarrow \left(\frac{0,8}{0,4} \right)^{n_{\text{B}}} = 2^{n_{\text{B}}} = 4$$

$$n_{\text{B}} = 2$$

$$\left(\frac{c_{\text{B},2}}{c_{\text{B},1}} \right)^2 \left(\frac{c_{\text{A},2}}{c_{\text{A},1}} \right)^{n_{\text{A}}} = \frac{8192}{2048} \rightarrow \left(\frac{1,6}{0,8} \right)^2 \left(\frac{0,2}{0,5} \right)^{n_{\text{A}}} = 4$$

$$2^2 \cdot 0,4^{n_{\text{A}}} = 4$$

$$0,4^{n_{\text{A}}} = 1$$

$$n_{\text{A}} = 0$$

$$\left(\frac{c_{\text{B},3}}{c_{\text{B},1}} \right)^2 \left(\frac{c_{\text{C},3}}{c_{\text{C},1}} \right)^{n_{\text{C}}} = \frac{2352}{2048} \rightarrow \left(\frac{0,7}{0,8} \right)^2 \left(\frac{0,3}{0,2} \right)^{n_{\text{C}}} = 1,148$$

$$1,5^{n_{\text{C}}} = 1,148 \cdot \left(\frac{0,8}{0,7} \right)^2 = 1,5$$

$$n_{\text{C}} = 1$$

$$r = k c_{\text{A}}^0 c_{\text{B}}^2 c_{\text{C}}^1$$

$$k = r c_{\text{B}}^{-2} c_{\text{C}}^{-1} = 2,048 \cdot 10^{-3} \cdot 0,8^{-2} \cdot 0,2^{-1} \text{ dm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$k = 0,016 \text{ dm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

21. Feladat

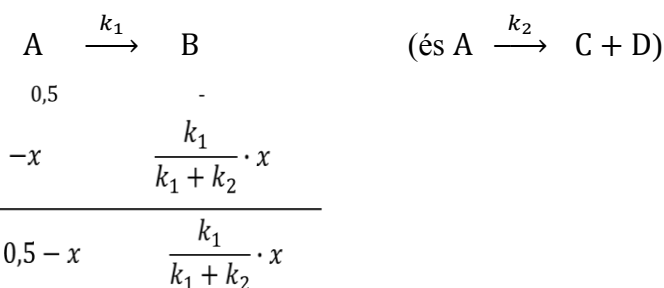
a) Írjuk fel B és C diffegyenletét!

$$\left. \begin{aligned} \frac{d[B]}{dt} &= k_1[A] \\ \frac{d[C]}{dt} &= k_2[A] \end{aligned} \right\} \quad \text{Tehát éppen } k_1/k_2 \text{ arányban képződnek}$$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{9,0}{3,6} = 2,5 \quad \rightarrow \quad [B]:[C] = 2,5:1$$

b) Hogy alakul ez esetben a B diffegyenlete?

$$\frac{d[B]}{dt} = k_1[A]$$



$$\frac{d[B]}{dt} = k_1[A] \quad \rightarrow \quad \frac{d\left(\frac{k_1}{k_1 + k_2} \cdot x\right)}{dt} = k_1(0,5 - x)$$

$$\frac{k_1}{k_1 + k_2} \frac{dx}{dt} = k_1(0,5 - x)$$

$$\frac{1}{0,5 - x} dx = (k_1 + k_2) dt$$

$$\int_0^x \frac{1}{0,5 - x} dx = \int_0^t (k_1 + k_2) dt$$

$$-\ln(0,5 - x) = (k_1 + k_2)t$$

$$x = 0,5 \text{ mol} - e^{-(k_1 + k_2)t} = 0,5 \text{ mol} - e^{-(9,0 + 3,6) \cdot 10^{-3} \cdot 120}$$

$$x = 0,28 \text{ mol} \quad \rightarrow \quad [B] = \frac{k_1}{k_1 + k_2} x = \frac{9,0}{9,0 + 3,6} \cdot 0,28 \text{ mol} = 0,2 \text{ mol}$$

22. Feladat

$$\frac{d[\text{O}_3]}{dt} = -k_1[\text{O}_3] - k_2[\text{O}_3][\text{O}]$$

$$\frac{d[\text{O}]}{dt} = k_1[\text{O}_3] - k_2[\text{O}_3][\text{O}] \cong 0$$

$$k_1[\text{O}_3] = k_2[\text{O}_3][\text{O}] \rightarrow \frac{k_1}{k_2} = [\text{O}]$$

$$\frac{d[\text{O}_3]}{dt} = -k_1[\text{O}_3] - \frac{k_2 k_1}{k_2}[\text{O}_3] = -2k_1[\text{O}_3] = -k'[\text{O}_3]$$

23. Feladat

$$\frac{k(625 \text{ K})}{k(725 \text{ K})} = \frac{A}{A} \cdot \frac{\exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot 625 \text{ K}}\right)}{\exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot 725 \text{ K}}\right)} = \exp\left(\frac{E_a}{R} \cdot \left(\frac{1}{725 \text{ K}} - \frac{1}{625 \text{ K}}\right)\right)$$

$$E_a = \frac{R \cdot \ln(0,0543)}{-2,207 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}} = 109744 \text{ J/mol} \cong 110 \text{ kJ/mol}$$

24. Feladat

$$n_A = 2, n_B = 1, n_C = 0, k = 3,0 \cdot 10^{-2} \text{ dm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

25. Feladat

$$A = 2,89 \cdot 10^{12} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}, E_a = 199 \text{ kJ mol}^{-1}$$

26. Feladat

$$n_A = 2; n_B = 1,5; n_C = 0,5; k = 4,04 \text{ dm}^9 \text{ mol}^{-3} \text{ s}^{-1}$$

27. Feladat

$$\text{a) } A = 9,66 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$$

$$\text{b) } A = 6,98 \cdot 10^6 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

28. Feladat

$$[\text{NO}_3] = \frac{k_1[\text{N}_2\text{O}_5]}{(k_2 + k_3)[\text{NO}_2]}$$

$$[\text{NO}] = \frac{k_3 k_1}{(k_2 + k_3)k_4}$$

29. Feladat

$$28,2 \text{ kJ mol}^{-1}$$

30. Feladat

$$E_a = 62375 \text{ J/mol}$$

$$A = 9,85 \cdot 10^{17} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

31. Feladat

$$1,664 \cdot 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3}$$

32. Feladat

a) $n = 2$

b) $A = 9,51 \cdot 10^{14} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$, $E_a = 240 \text{ kJ/mol}$

c) $[\text{F}] = 6,284 \cdot 10^{-4} \text{ mol dm}^{-3}$, $[\text{B}] = 0,01437 \text{ mol dm}^{-3}$

33. Feladat

$$k_1 = 0,0510 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ órá}^{-1}$$

$$k_2 = 0,0080 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ órá}^{-1}$$

34. Feladat

$$k = 4,468 \cdot 10^{-3} \text{ min}^{-1}$$

35. Feladat

$$k' = k \cdot c_A \rightarrow k = 251,4 \text{ dm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

36. Feladat

$$n = 2, k = 0,613 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

37. Feladat

$$k = 5,18 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$$

38. Feladat

$$E_a = 29,326 \text{ kJ/mol}$$

39. Feladat

$$k_{A+B} = 1,152 \cdot 10^{-4} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$k_A = 2,643 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$$

40. Feladat

$$2$$

41. Feladat

$$5,3 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}, 1,88 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$$

42. Feladat

$$\begin{array}{lll} \text{a) } 66,2 \text{ mmol/dm}^3; & \text{b) } 56,1 \text{ mmol/dm}^3; & \text{c) } 51,1 \text{ mmol/dm}^3; \\ \text{d) } 48,0 \text{ mmol/dm}^3; & \text{e) } 48,8 \text{ mmol/dm}^3; & \text{f) } 42,9 \text{ mmol/dm}^3 \end{array}$$

43. Feladat

$$k_0 = A_0 T^{n_0} \exp\left(-\frac{E_0}{RT}\right) = 4,00 \cdot 10^{20} \text{ cm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$k_\infty = A_\infty = 1,81 \cdot 10^{13} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$[M] = \frac{p}{RT} = \frac{0,005}{8,314 \cdot 800} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} = 7,52 \cdot 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$P_r = \frac{k_0[M]}{k_\infty} = \frac{4,00 \cdot 10^{20} \cdot 7,52 \cdot 10^{-7}}{1,81 \cdot 10^{13}} = 16,62$$

$$k_{bi} = k_\infty \cdot \left(\frac{P_r}{P_r + 1}\right) = 1,81 \cdot 10^{13} \cdot \left(\frac{16,64}{17,64}\right) \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$k_{bi} = 1,71 \cdot 10^{13} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

44. Feladat

- a) p_0 : $k_{\text{uni}} = 3,079 \cdot 10^{-31} \text{ s}^{-1}$
 b) $0,5 p_0$: $k_{\text{uni}} = 1,819 \cdot 10^{-31} \text{ s}^{-1}$
 $2 p_0$: $k_{\text{uni}} = 4,711 \cdot 10^{-31} \text{ s}^{-1}$
 $11 p_0$: $k_{\text{uni}} = 8,319 \cdot 10^{-31} \text{ s}^{-1}$

45. Feladat

- a) $[\text{C}_2\text{H}_5] = 1,45 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$
 b) $[\text{C}_2\text{H}_6]/[\text{CH}_3] = 1,696$

46. Feladat

- a) Hamarosan.
 b) -||-
 c) -||-

47. Feladat

a) A táblázat alaján látható, hogy a két legnagyobb nyomás értéknél a nyomást tovább növelve már nem nő a sebességi együttható, tehát ez az érték k_{∞} .

$$k_{\infty} = 1,44 \cdot 10^2 \text{ s}^{-1}$$

Az első három értéknél a sebességi együttható lineárisan növekszik a nyomással, tehát ez már a 0 nyomású határérték. Ennek a növekedésnek a meredeksége lesz a k_0 .

$$k_{\text{uni}} = k_0 \cdot [\text{M}] \rightarrow k_0 = k_{\text{uni}}/[\text{M}]$$

$$[\text{M}] = \frac{p}{RT} = \frac{100}{8,314 \cdot 1150} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} = 0,0105 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

(A nyomást kPa-ban írtuk be, így a koncentráció mol dm^{-3} -ben adódott!)

$$k_0 = \frac{k_{\text{uni}}}{[\text{M}]} = \frac{4,30 \cdot 10^{-5}}{0,0105} \frac{\text{dm}^3}{\text{mol s}} = 4,11 \cdot 10^{-3} \frac{\text{dm}^3}{\text{mol s}}$$

b) Ha $p = 3 \text{ bar} \rightarrow [\text{M}] = 300 / (8,314 \cdot 1150) \text{ mol dm}^{-3} = 0,03138 \text{ mol dm}^{-3}$.

$$P_r = k_0 [\text{M}] / k_{\infty} = 4,11 \cdot 10^{-3} \cdot 0,03138 / 1,44 \cdot 10^2 = 8,96 \cdot 10^{-7}$$

$$k_{\text{uni}} = k_{\infty} \cdot (P_r / (P_r + 1)) \approx k_{\infty} \cdot P_r = 1,44 \cdot 10^2 \text{ s}^{-1} \cdot 8,96 \cdot 10^{-7} = 1,29 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$$

48. Feladat

1-es index: 2 bar; 2-es index: 10 bar.

$$[M]_1 = \frac{p_1}{RT} = \frac{200}{8,314 \cdot 800} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} = 0,0301 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$[M]_2 = \frac{p_2}{RT} = \frac{1000}{8,314 \cdot 800} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} = 0,150 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$P_r = \frac{k_0[M]}{k_\infty} \rightarrow \frac{P_{r,1}}{P_{r,2}} = \frac{[M]_1}{[M]_2} = \frac{0,03}{0,15} = 0,2$$

$$\frac{k_{bi,1}}{k_{bi,2}} = \frac{1,063}{2,475} = 0,4295 = \frac{k_\infty \left(\frac{P_{r,1}}{P_{r,1} + 1} \right)}{k_\infty \left(\frac{P_{r,2}}{P_{r,2} + 1} \right)} = \frac{P_{r,1}(P_{r,2} + 1)}{P_{r,2}(P_{r,1} + 1)}$$

Két ismeretlen, két egyenlet
 $P_{r,1}$ -re és $P_{r,2}$ -re

$$\left. \begin{aligned} \frac{P_{r,1}}{P_{r,2}} &= 0,2 \\ \frac{P_{r,1}(P_{r,2} + 1)}{P_{r,2}(P_{r,1} + 1)} &= 0,4295 \end{aligned} \right\}$$

$$P_{r,1} = 0,2P_{r,2}$$

$$\frac{0,2P_{r,2}(P_{r,2} + 1)}{P_{r,2}(0,2P_{r,2} + 1)} = 0,4295$$

$$0,2(P_{r,2} + 1) = 0,4295(0,2P_{r,2} + 1)$$

$$0,2P_{r,2} + 0,2 = 0,0859P_{r,2} + 0,4295$$

$$P_{r,2} = \frac{0,4295 - 0,2}{0,2 - 0,0859} = 2,0$$

$$P_{r,1} = 0,2P_{r,2} = 0,40$$

(Elég csak az egyiket kiszámítani, ugyanis):

$$k_{bi} = k_\infty \left(\frac{P_r}{P_r + 1} \right) \rightarrow k_\infty = k_{bi} \left(\frac{P_r + 1}{P_r} \right) = \underline{3,72 \cdot 10^{10} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}}$$

$$P_r = \frac{k_0[M]}{k_\infty} \rightarrow k_0 = \frac{P_r \cdot k_\infty}{[M]} = \underline{4,96 \cdot 10^{11} \text{ dm}^6 \text{ mol}^{-2} \text{ s}^{-1}}$$

49. Feladat

$$8,16 \cdot 10^{12} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

50. Feladat

$$k_0 = 3,19 \cdot 10^{16} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}, k_{\infty} = 4,52 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$$

51. Feladat

Hamarosan.

52. Feladat

Hamarosan.

53. Feladat

Hamarosan.

54. Feladat

$$\ln k = \ln \left(\frac{k_B T}{h} \right) - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{RT} + \frac{\Delta_r S^\ddagger}{R}$$

Ezt a két hőmérsékletre felírva, majd a két egyenletet kivonva:

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \ln \left(\frac{T_1}{T_2} \right) - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$\ln \frac{722}{9460} = \ln \left(\frac{700}{800} \right) - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{R} \left(\frac{1}{700} - \frac{1}{800} \right)$$

$$-2,573 = -0,1335 - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{R} \cdot 1,786 \cdot 10^{-4}$$

$$\Delta_r H^\ddagger = 113,6 \text{ kJ/mol}$$

Visszahelyettesítés az egyik egyenletbe:

$$\ln k = \ln \left(\frac{k_B}{h} \right) + \ln T - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{RT} + \frac{\Delta_r S^\ddagger}{R}$$

$$\ln 722 = \ln \left(\frac{1,381 \cdot 10^{-23}}{6,626 \cdot 10^{-34}} \right) + \ln 700 - \frac{1,136 \cdot 10^5}{8,314 \cdot 700} + \frac{\Delta_r S^\ddagger}{8,314}$$

$$\Delta_r S^\ddagger = -34,99 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

55. Feladat

$$k_1 = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot 900 \text{ K}}\right) = 2,448 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot 1000 \text{ K}}\right) = 8,293 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$$

$$k_3 = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot 1100 \text{ K}}\right) = 2,251 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

$$\ln k = \ln\left(\frac{k_B T}{h}\right) - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{RT} + \frac{\Delta_r S^\ddagger}{R}$$

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \ln\left(\frac{T_1}{T_2}\right) - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

$$\Delta_r H^\ddagger = -R \cdot \frac{\ln(k_1/k_2) - \ln(T_1/T_2)}{1/T_1 - 1/T_2}$$

i	1	2	3
T_i / K	900	1000	1100
k_i / s^{-1}	$2,448 \cdot 10^{11}$	$8,293 \cdot 10^{11}$	$2,251 \cdot 10^{12}$

$$\Delta_r H_1^\ddagger = -R \cdot \frac{\ln(k_1/k_2) - \ln(T_1/T_2)}{1/T_1 - 1/T_2} \rightarrow \Delta_r H_1^\ddagger = 83,41 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_r H_2^\ddagger = -R \cdot \frac{\ln(k_2/k_3) - \ln(T_2/T_3)}{1/T_2 - 1/T_3} \rightarrow \Delta_r H_2^\ddagger = 82,60 \text{ kJ/mol}$$

Visszahelyettesítés:

$$\ln k = \ln\left(\frac{k_B}{h}\right) + \ln T - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{RT} + \frac{\Delta_r S^\ddagger}{R}$$

$$\Delta_r S^\ddagger = R \left(\ln k - \ln\left(\frac{k_B}{h}\right) - \ln T + \frac{\Delta_r H^\ddagger}{RT} \right)$$

$$\Delta_r S_1^\ddagger = 56,6 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$\Delta_r S_2^\ddagger = 55,7 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

56. Feladat

$$\ln k = \ln\left(\frac{k_B T}{h}\right) - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{RT} + \frac{\Delta_r S^\ddagger}{R}$$

Ismert, hogy $k_1/k_2 = 1/2$ és $T_1 = 600 \text{ K}$, $T_2 = 600 \text{ K} \cdot 1,2 = 720 \text{ K}$

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \ln\left(\frac{T_1}{T_2}\right) - \frac{\Delta_r H^\ddagger}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

$$\Delta_r H^\ddagger = -R \cdot \frac{\ln(k_1/k_2) - \ln(T_1/T_2)}{1/T_1 - 1/T_2} \rightarrow \Delta_r H^\ddagger = \underline{\underline{15,3 \text{ kJ/mol}}}$$

57. Feladat

Élve a gyors előegyensúly közelítéssel a k_2 együttthatójú lépés elhanyagolható.

Egyensúlyban: $k_1[A] = k_{-1}[A^\ddagger]$

(Azaz az oda- és a visszaalakulás sebessége megegyezik. Ugyanerre az összefüggésre jutunk, ha ilyenkor A-ra vagy $A^\ddagger$ -re kvázistacionárius közelítést alkalmazunk)

Ez alapján: $K = [A^\ddagger] / [A] = k_1 / k_{-1}$

Vegyük észre, hogy az így kiszámolt egyensúlyi állandó az átmenetiállapot-képződéshez tartozik, tehát: $K = K^\ddagger$

$$K = \exp\left(-\frac{\Delta_r G}{RT}\right) \rightarrow \Delta_r G^\ddagger = -RT \cdot \ln K^\ddagger$$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

$$\Delta_r H^\ddagger = T\Delta_r S^\ddagger - RT \ln \frac{k_1}{k_{-1}} = 9716 \text{ J/mol}$$

58. Feladat

Hamarosan.

Képletjegyzék

$$\begin{aligned}
 k &= \pi d^2 \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu}} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) & \mu &= \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} & Z' &= Z \cdot N_A N_B \\
 K &= \prod_{i=1}^r \left(\frac{q_{m,i}^\Theta}{N_A}\right)^{\nu_i} \cdot e^{-\frac{\Delta_r E_0}{RT}} & q &= q^{\text{trans}} \cdot q^{\text{rot}} \cdot q^{\text{vib}} \cdot q^{\text{el}} & q^{\text{trans}} &= \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \cdot V \\
 q^{\text{rot}} &= \frac{k_B T}{h c B} & q^{\text{rot}} &= \frac{1}{\sigma} \left(\frac{k_B T}{h c}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{\pi}{ABC}} & q^{\text{vib}} &= \frac{1}{1 - e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}} \\
 q^{\text{el}} &= g_e & q^{\text{el}} &= g_{e,\text{alap}} + \sum_{\forall i} g_{e,i} \exp\left(-\frac{\varepsilon_i^*}{kT}\right) & k &= \frac{k_B T}{h} \left(\frac{q^{\ddagger\Theta}}{q_A^\Theta}\right) \cdot e^{-\frac{\Delta_r E_0^\ddagger}{RT}} \\
 k &= \frac{k_B T}{h} \left(\frac{N_A q^{\ddagger\Theta}}{q_A^\Theta q_B^\Theta}\right) \cdot e^{-\frac{\Delta_r E_0^\ddagger}{RT}} & r &= \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu} \frac{dn}{dt} = \frac{V}{\nu} \frac{dc}{dt} & r &= k \prod_j [A_j]^{\alpha_j} \quad \frac{dc_A}{dt} = -k c_A \\
 c_A(t) &= c_{A,0} \cdot e^{-kt} & t_{1/2} &= \frac{\ln 2}{k} & \tau &= 1/k & \frac{dc_A}{dt} &= \frac{dc_B}{dt} = -k c_A c_B \\
 \frac{1}{c_A(t)} &= \frac{1}{c_{A,0}} + kt & \frac{1}{c_{B,0} - c_{A,0}} \ln\left(\frac{c_{B,t} c_{A,0}}{c_{A,t} c_{B,0}}\right) &= kt & t_{1/2} &= \frac{1}{k c_{A,0}} & \frac{dc_A}{dt} &= -k c_A c_B \approx -k' c_A \\
 \frac{1}{c^2} &= \frac{1}{c_0^2} + 2kt & c &= n^{-1} \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{c_0^{n-1}} + (n-1)kt}} & \frac{dc_A}{dt} &= -k(c_A)^n \\
 \frac{dc_A}{dt} &= -k(c_A)^{n_A} (c_B)^{n_B} (c_C)^{n_C} \dots & [k] &= \frac{\text{dm}^{3(n-1)}}{\text{mol}^{(n-1)} \cdot \text{s}} = \text{M}^{1-n} \text{s}^{-1} & \frac{d[A_j]}{dt} &= \sum_i \nu_{ij} k_i \prod_j [A_j]^{\nu_{ij}^B} \\
 \frac{dc_{\text{QSSA}}}{dt} &\approx 0 & k &= A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) & k &= A \cdot T^n \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) & E_a &= -R \left(\frac{\partial \ln k}{\partial (1/T)}\right) \\
 t_{1/2} &= \frac{2^{n-1}-1}{(n-1)k_n c_0^{n-1}} & k_{\text{uni}} &= k_\infty \left(\frac{P_r}{P_r+1}\right) & k_{\text{bi}} &= k_\infty \left(\frac{P_r}{P_r+1}\right) & P_r &= \frac{k_0[M]}{k_\infty} \quad [M] = p/RT \\
 K &= \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\ominus}{RT}\right) & k &= k^\ddagger K^\ddagger = \frac{k_B T}{h} \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\ddagger}{RT}\right) & \Delta G &= \Delta H - T\Delta S \\
 k &= \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 &= \frac{k_B T}{h} \cdot \frac{k_B T}{p^\ominus} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta_r H^\ddagger}{RT}\right) \cdot \exp\left(\frac{\Delta_r S^\ddagger}{R}\right)
 \end{aligned}$$