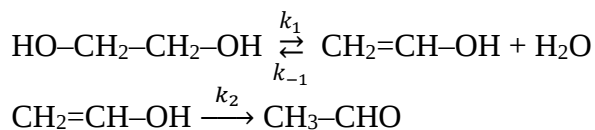


1. Feladat (10 pont)

Egy unimolekulás reakció sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggése leírható az egyszerű Arrhenius-egyenlettel a 800 K – 1000 K hőmérséklettartományban, a következő paraméterek szerint: $A = 5,17 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$, $E_a = 42,0 \text{ kJ/mol}$. Állapítsd meg ez alapján, hogy ebben a hőmérséklettartományban mekkora a reakció aktiválási entalpiája és entrópiája, ha azok állandónak tekinthetők ezen körülmények között!

2. Feladat (12 pont)

A következő összetett reakciómechanizmus szerint az etilénlikol magas hőmérsékleten megfordítható reakcióban bomlik eténolra, majd az átalakul acetaldehiddé:



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

b) Milyen összefüggés írható fel a sebességi együtthatók és koncentrációk között, ha az eténolra alkalmazható a kvázistacionárius közelítés? ($d[\text{CH}_2=\text{CH-OH}]/dt = \dots \approx 0$)

c) A b) feladatban felírt összefüggés, és a kinetikai differenciálegyenlet-rendszer figyelembe vételével írd fel, hogy milyen arányban lesz jelen a HO-CH₂-CH₂-OH, H₂O és CH₃-CHO a reakcióelegyben akkor, mikor az etilénlikol aktuális koncentrációja 0,5 mol/dm³, és kiindulásban csak etilénlikol volt jelen 1,0 mol/dm³ kezdeti koncentrációval!

3. Feladat (10 pont)

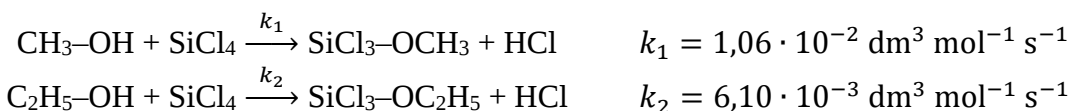
Adott a következő összetett reakció: $2 \text{ A} + 2 \text{ B} + \text{ C} \rightarrow \text{ P}$. Különböző aktuális reaktáns-koncentrációk mellett mértük az aktuális reakciósebességet. Az eredményeket a következő táblázat tartalmazza:

$[\text{A}]_t / \text{mol dm}^{-3}$	$[\text{B}]_t / \text{mol dm}^{-3}$	$[\text{C}]_t / \text{mol dm}^{-3}$	$[\text{P}]_t / \text{mol dm}^{-3}$	$r_t / \mu\text{mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1}$
0,18	0,48	0,78	0,04	121
0,15	0,48	0,34	0,74	111
0,63	0,33	0,29	0,34	107
0,26	0,48	0,34	0,44	146

Határozd meg az egyes reaktánsok részrendjét, illetve a reakció sebességi együtthatóját a mérési adatok alapján, ha tudjuk, hogy csak egész, vagy félegész rendek jöhetnek szóba!

4. Feladat (12 pont)

Egy elegy 12,3 mol/dm³ metanolt és 8,53 mol/dm³ etanolt tartalmaz. Ehhez az elegyhez SiCl₄-ot fecskendezünk, úgy, hogy koncentrációja 8,71 mmol/dm³ legyen, és vizsgáljuk a lejátszódó másodrendű kinetikát követő párhuzamos reakciókat:



Mekkora a SiCl₄ felezési ideje, ha a reakcióelegy térfogata, illetve a metanol és etanol koncentrációja állandónak vehető a folyamat során?

KÉPLETGYŰJTEMÉNY

$$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \quad R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} \quad k_B = 1,381 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$r = \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu} \frac{dn}{dt} = \frac{V}{\nu} \frac{dc}{dt} \quad r = k \prod_j [A_j]^{\alpha_j} \quad \frac{dc_A}{dt} = -k c_A$$

$$c_A(t) = c_{A,0} \cdot e^{-kt} \quad t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} \quad \tau = 1/k \quad \frac{dc_A}{dt} = \frac{dc_B}{dt} = -k c_A c_B$$

$$\frac{1}{c_A(t)} = \frac{1}{c_{A,0}} + kt \quad \frac{1}{c_{B,0} - c_{A,0}} \ln \left(\frac{c_{B,t} c_{A,0}}{c_{A,t} c_{B,0}} \right) = kt \quad t_{1/2} = \frac{1}{k c_{A,0}} \quad \frac{dc_A}{dt} = -k c_A c_B \approx -k' c_A$$

$$\frac{1}{c^2} = \frac{1}{c_0^2} + 2kt \quad c = \sqrt[n-1]{\frac{1}{\frac{1}{c_0^{n-1}} + (n-1)kt}} \quad \frac{dc_A}{dt} = -k(c_A)^n \quad \frac{dc}{dt} = -(k_1 + k_2)c$$

$$\frac{dc_A}{dt} = -k(c_A)^{n_A}(c_B)^{n_B}(c_C)^{n_C} \dots \quad [k] = \frac{\text{dm}^{3(n-1)}}{\text{mol}^{(n-1)} \cdot \text{s}} = \text{M}^{1-n} \text{s}^{-1} \quad \frac{d[A_j]}{dt} = \sum_i \nu_{ij} k_i \prod_j [A_j]^{\nu_{ij}^B}$$

$$\frac{dc_{\text{QSSA}}}{dt} \approx 0 \quad k = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad k = A \cdot T^n \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad E_a = -R \left(\frac{\partial \ln k}{\partial (1/T)} \right)$$

$$t_{1/2} = \frac{2^{n-1}-1}{(n-1)k_n c_0^{n-1}} \quad k_{\text{uni}} = k_{\infty} \left(\frac{P_r}{P_r+1} \right) \quad k_{\text{bi}} = k_{\infty} \left(\frac{P_r}{P_r+1} \right) \quad P_r = \frac{k_0[M]}{k_{\infty}} \quad [M] = p/RT$$

$$K = \exp\left(-\frac{\Delta_r G^{\ominus}}{RT}\right) \quad k = k^{\ddagger} K^{\ddagger} = \frac{k_B T}{h} \exp\left(-\frac{\Delta_r G^{\ddagger}}{RT}\right) \quad \Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

$$k = \frac{k_B T}{h} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta_r H^{\ddagger}}{RT}\right) \cdot \exp\left(\frac{\Delta_r S^{\ddagger}}{R}\right) \quad k = \frac{k_B T}{h} \cdot \frac{k_B T}{p^{\ominus}} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta_r H^{\ddagger}}{RT}\right) \cdot \exp\left(\frac{\Delta_r S^{\ddagger}}{R}\right)$$