Összetett reakciók, Arrhenius-egyenlet

3. óra

Órai feladatok

1) Az alábbi összetett reakciót vizsgáltuk:

$$2A + 2B + C \rightarrow \text{termékek}$$

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

	$[A]_0$ / mol dm^{-3}	$[B]_0$ / mol dm^{-3}	$[C]_0$ / mol dm^{-3}	v_0 / 10^{-4} mol dm^{-3} 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? ($n_A = 2$, $n_B = 1$, $n_C = 0$, $k = 3{,}0\cdot10^{-2}$ dm^6 mol^{-2} s^{-1})

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

$$A \rightarrow B \qquad k_1 = 9{,}0\cdot10^{-3}\ \text{s}^{-1}$$

$$A \rightarrow C + D \qquad k_2 = 3{,}6\cdot10^{-3}\ \text{s}^{-1}$$

Mennyi a B és a C anyag aránya 60 s elteltével? Mennyi a B anyag anyagmennyisége 2 perc elteltével, ha kezdetben 0,5 mol A anyagból indultunk ki? (2,5:1, 0,28 mol)

3) Adott az alábbi leegyszerűsített reakciómechanizmus az ózon fogyására:

$$O_3 \rightarrow O_2 + O \qquad k_1$$

$$O_3 + O \rightarrow O_2 \qquad k_2$$

A kvázistacionárius közelítés oxigénatomra való alkalmazásával fejezzük ki az ózon koncentrációjának időbeli változását úgy, hogy abban a köztitermék koncentrációja ne szerepeljen! ($d[O_3]/dt = -2k_1[O_3]$)

4) Az alábbi reakció sebességi együtthatóját vizsgáljuk:

$$CO + O_2 \rightarrow CO_2 + O$$

A sebességi együttható értéke 600 K hőmérsékleten $1{,}37\cdot10^{-5}$ cm^3 mol^{-1} s^{-1}, 700 K-en pedig $4{,}08\cdot10^{-3}$ cm^3 mol^{-1} s^{-1}. Hogyan adható meg k hőmérsékletfüggése az Arrhenius-egyenlet alapján? ($A = 2{,}89\cdot10^{12}$ cm^3 mol^{-1} s^{-1}, $E_a = 199$ kJ mol^{-1})

Felhasznált képletek, összefüggések

Összetett reakciókra: A + B + C + … → termék(ek)

$$v = k(c_A)^{n_A}(c_B)^{n_B}(c_C)^{n_C}\ldots \qquad v_0 = k(c_{A,0})^{n_A}(c_{B,0})^{n_B}(c_{C,0})^{n_C}\ldots \qquad [k] = \frac{\mathrm{dm}^{3(n-1)}}{\mathrm{mol}^{n-1}\mathrm{s}} = \mathrm{M}^{1-n}\mathrm{s}^{-1}$$

n_i: reaktáns részrendje, $\sum n_i = n$: reakció bruttó rendje

Párhuzamos reakciók: A → B (k_1), A → C (k_2)

$$\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{A}}{\mathrm{d}t} = -(k_1 + k_2)c_\mathrm{A} \qquad c_{\mathrm{A},t} = c_{\mathrm{A},0}\cdot\exp(-(k_1+k_2)t) \qquad c_{\mathrm{B},t} = c_{\mathrm{A},0}\cdot\frac{k_1}{k_1+k_2}(1-\exp(-(k_1+k_2)t))$$

Kvázistacionárius közelítés:

Általában nagy reaktivitású, kis koncentrációjú anyagokra alkalmazható, pl. gyökök esetén.

Felírva a QSSA-anyagra a sebességi differenciálegyenletét: $\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{QSSA}}{\mathrm{d}t} \approx 0$.

Ezt felhasználva egyéb anyagok sebességi egyenlete egyszerűbb formára alakítható.

Sebességi együttható hőmérsékletfüggése (Arrhenius-egyenlet):

$$k = A\exp\left(-\frac{E_\mathrm{a}}{RT}\right)$$