

Házi feladat 1.

2011. október 19.

1. móltört: x_B

Az oldott anyag mólokban kifejezett kémiai anyagmennyisége (n_B) hányad része az oldatban lévő mólokban kifejezett összes kémiai anyagmennyiségnek ($n_A + n_B$)

$$x_B = \frac{n_B}{n_A + n_B} = \frac{m_B / M_B}{m_A / M_A + m_B / M_B}$$

molaritás: m_B , [mol/kg]

Egy kg oldószerben (m_A) lévő, M_B moláris tömegű oldott anyag mólokban kifejezett kémiai anyagmennyisége (n_B)

$$m_B = \frac{n_B}{m_A} = \frac{m_B / M_B}{m_A}$$

molaritás: c_B , [mol/dm³]

Egy dm³ oldatban (V_0) lévő, M_B moláris tömegű oldott anyag mólokban kifejezett kémiai anyagmennyisége (n_B)

$$c_B = \frac{n_B}{V_0} = \frac{m_B / M_B}{V_0}$$

tömegszázalék: w/w %

100g oldatban ($m_A + m_B$) lévő oldott anyag grammokban kifejezett tömege (m_B), ami a tömegtört (w_B) százszorosa

$$w/w \% = \frac{m_B}{m_A + m_B} \cdot 100 \% = w_B \cdot 100 \%$$

térfogatszázalék: v/v %

100 cm³ oldatban (V_0) lévő oldott anyag térfogata (V_B), ami a térfogattört (ϕ_B) százszorosa

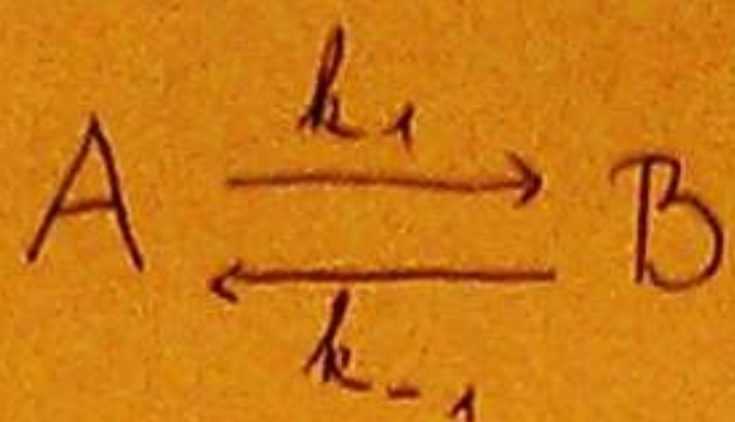
$$v/v \% = \frac{V_B}{V_0} \cdot 100 \% = \phi_B \cdot 100 \%$$

sűrűség: ρ , [g/cm³]

Az oldat 100 cm³-ben lévő oldott anyag grammokban mért tömegét adja meg $w/v \% = \frac{m_B}{V_0}$

$$2, a, \frac{d[A]}{dt} = -k_1[A]$$

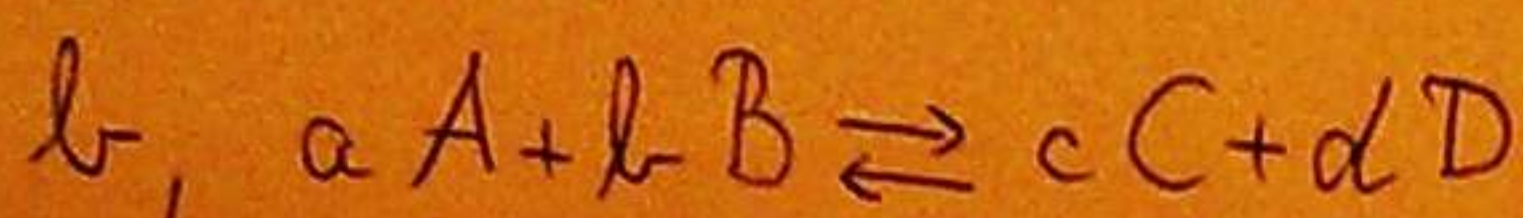
$$\frac{d[B]}{dt} = -k_{-1}[B]$$



Egyensúlyban $\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} \Rightarrow -k_1[A] = -k_{-1}[B]$

$$\frac{k_1}{k_{-1}} = \frac{[B]}{[A]}$$

$$K = \frac{[B]}{[A]} \quad \checkmark \quad \Leftarrow$$



$$K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

reakciósebesség $v = -\frac{d[A]}{a dt} = -\frac{d[B]}{b dt} = \frac{d[C]}{c dt} = \frac{d[D]}{d dt}$

$$v = k_1 [A]^m [B]^n$$

$$v = k_{-1} [C]^o [D]^p$$

* megfelelő anyagfajtájára vonatkozó viszonyokkal
Ha a ^{megfelelő} sztoichiometriai együtthatók megegyeznek a reakció ~~rendűségével~~, vagyis $m=a$, $n=b$, $o=c$ és $p=d$, akkor K megadható a sebességi állandók hányadosaként.

3, Az n -ed rendű reakció sebességét a

$$v = -\frac{dC_A}{dt} = k_n C_A^n \quad \text{differenciál egyenlet adja meg.}$$

Szétválasztva a változókat és integrálva $n \neq 1$ esetén:

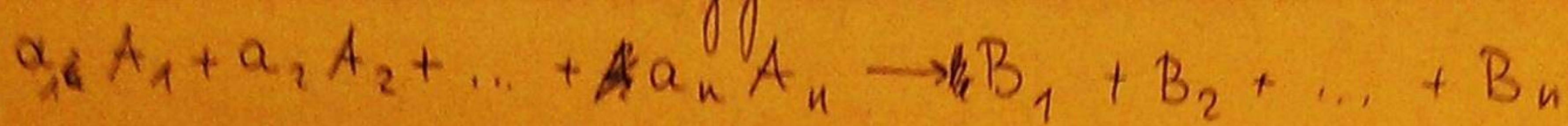
$$\int_{C_{A_0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A^n} = - \int_{t_0}^t k_n dt,$$

$$\frac{1}{C_{A_0}^{n-1}} - \frac{1}{C_A^{n-1}} = -k_n (n-1) t$$

A kiindulási anyag koncentrációja $(n-1)$ -ed fokú hiperbola f. neműt, csökken az idő f. -ében a termék pedig hasonló f. neműt nő.

A kifejezésben k_n az n -ed rendű reakció reakciósebességi állandója, mértékegysége $\frac{(\text{dm}^3/\text{mol})^{(n-1)}}{\text{s}}$.

3. megoldás "koncentráció" oldalon



A_i rendűsége tehát a_i .

Ka a reakció rendűsége n , akkor $\sum_{i=1}^n a_i = n$

$$v = k_n [A_1]^{a_1} [A_2]^{a_2} \dots [A_n]^{a_n}$$

$$k_n = - \frac{d[A]}{dt [A_1]^{a_1} [A_2]^{a_2} \dots [A_n]^{a_n}} = - \frac{M}{s \cdot M^n} = - \frac{1}{M^{(n-1)} \cdot s} = \frac{(\text{dm}^3/\text{mol})^{(n-1)}}{s}$$

4, bomlási állandója:

$$A = A_0 e^{-kt}$$

$$\frac{A_0}{2} = A_0 e^{-k T_{1/2}}$$

$$\ln 2 = k \cdot T_{1/2}$$

$$T_{1/2} = 5 \text{ nap} = 432000 \text{ sec}$$

$$k = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} = 1,6045 \cdot 10^{-6} \frac{1}{\text{sec}} = \lambda$$

relaxációs ideje,

$$\tau \ln 2 = T_{1/2}$$

$$\tau = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{1,6045 \cdot 10^{-6} \frac{1}{\text{sec}}} = 623244,2577 \text{ sec}$$

$$\left(\begin{array}{l} \frac{A_0}{e} = A_0 \cdot e^{-k\tau} \\ \frac{1}{e} = e^{-k\tau} \\ -1 = -k\tau \\ \tau = \frac{1}{k} \end{array} \right)$$

5, $v = k \cdot [A]^n$ egyenletet
lineárisálva kell $\rightarrow \ln v = \ln k + n \cdot \ln [A]$

egyenlet egyenlete: $Ax + B = y$
 $n \cdot \ln [A] + \ln k = \ln v$

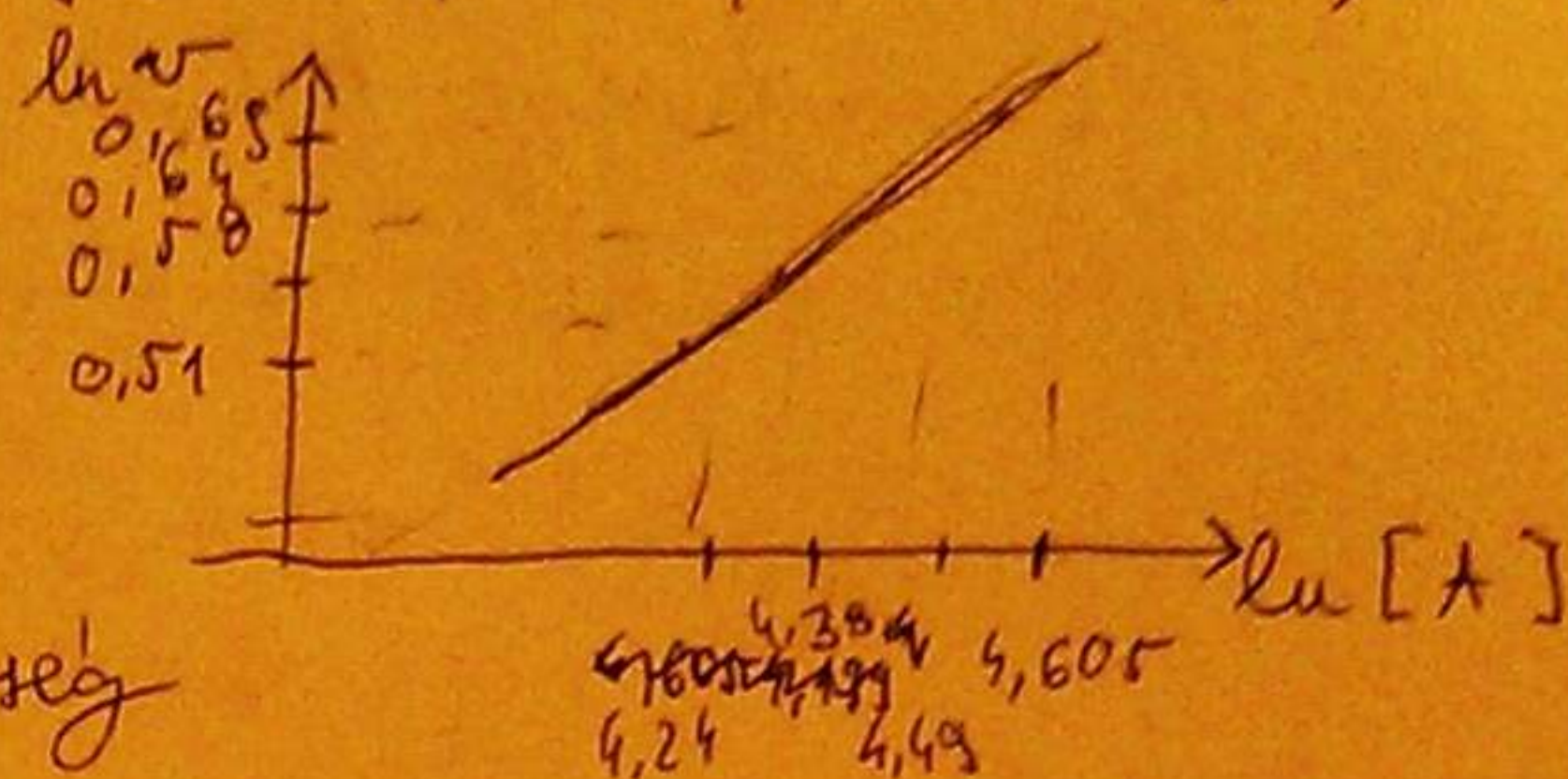
	$\ln [A]$	$[A] \text{ mM}$	$v \frac{\mu\text{M}}{\text{min}}$	$\ln v$
1.	4,605	100	2	0,693
2.	4,499	90	1,9	0,641
3.	4,382	80	1,79	0,582
4.	4,248	70	1,67	0,512

$$n = \frac{\ln v_1 - \ln v_2}{\ln [A_1] - \ln [A_2]} = 0,5$$

$$\ln k = \ln v_2 - n \cdot \ln [A_2] = 0,641 - 0,5 \cdot 4,499 = -1,6$$

$$(\ln k = \ln v_1 - n \cdot \ln [A_1] = 0,693 - 0,5 \cdot 4,605 = -1,6)$$

$$\underline{k = 0,201 = \frac{1}{5}}$$



6, $v = k_2 \sqrt{K [Cl_2]} [CO]$ reakciósebesség

$$v_B = k_B [Cl_2]^n [CO_2]^n$$

$$v_B \approx v_2 = k_2 [Cl] [CO] = k_2 K^{1/2} \cdot [Cl_2]^{1/2} \cdot [CO] \quad \checkmark$$

$$[Cl] = \sqrt{K [Cl_2]}$$

7, a, $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln K = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[C]^2 [D]}{[A]^2 [B]}$

$\downarrow$
 $\Delta G = 0$ egyensúlyi állapot

$$\Delta G^\circ = -RT \ln \frac{[C]^2 [D]}{[A]^2 [B]}$$

$$\Rightarrow \underline{\Delta G^\circ = -56093,72 \text{ J/mol}}$$

$$\rightarrow R = 8,3144 \text{ J/K mol}$$

$$\rightarrow T = 20^\circ\text{C} = 293 \text{ K}$$

$$\rightarrow K = 10^{10}$$

b, $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln K = \Delta G^\circ + R \cdot T \cdot \ln(900) = -39522,27551 \text{ J/mol}$

$$K = \frac{[C]^2 [D]}{[A]^2 [B]} = \frac{(3 \cdot 10^{-5} \text{ M})^2 (2 \cdot 10^{-2} \text{ M})}{(1 \cdot 10^{-3} \text{ M})^2 (2 \cdot 10^{-8} \text{ M})} = 900$$

egyensúlyi állapot > 1
egyensúlyban $[C]^2 [D]$ a nagyobb

$\ominus$ az értek, vagyis
 $2A + B \rightarrow 2C + D$
irányba fog menni
spontán a reakció

8, $T_1 = 30^\circ\text{C} = 303 \text{ K}$

$T_2 = 37^\circ\text{C} = 310 \text{ K}$

$$k_1 = A e^{-E_A/RT_1}$$

$$k_2 = A e^{-E_A/RT_2}$$

$$k_2 = 10 k_1$$

$$10 A e^{-E_A/RT_1} = A e^{-E_A/RT_2}$$

$$\ln(10) = \frac{E_A}{RT_1} - \frac{E_A}{RT_2} \rightarrow R \ln(10) = E_A \left(\frac{T_2 - T_1}{T_1 T_2} \right)$$

$$E_A = \frac{R \ln(10) T_1 T_2}{T_2 - T_1} = \frac{2933,52 \text{ J} \cdot 1798253,546}{7} = 256893,3637 \text{ J}$$