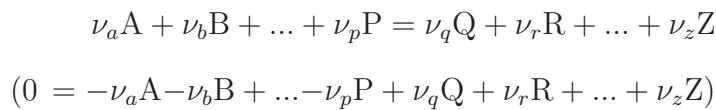


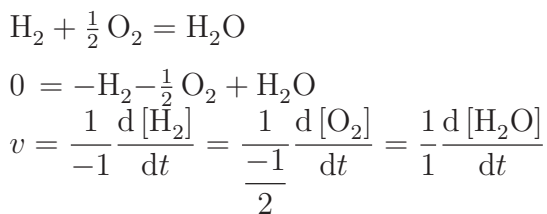
1. A reakciósebesség fogalma

Állandó hőmérsékleten és térfogaton a reakciósebességet a



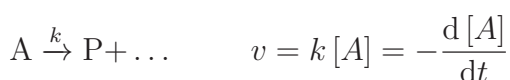
sztoichiometriai egyenlettel felírható folyamatra a következőképpen definiáljuk: $v = \frac{1}{\nu_j} \frac{d[J]}{dt}$ ahol ν_j a J -ik komponens sztoichiometriai együtthatója, ami a reaktánsokra negatív, a termékekre pozitív előjelű. (Így, $v = \frac{1}{\nu_a} \frac{d[A]}{dt} = \frac{1}{\nu_b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{\nu_p} \frac{d[P]}{dt} = \frac{1}{\nu_q} \frac{d[Q]}{dt} = \frac{1}{\nu_r} \frac{d[R]}{dt} = \frac{1}{\nu_z} \frac{d[Z]}{dt} \geq 0$)
 A reakciósebesség dimenziója: $\dim(v) = [\text{koncentráció} \cdot \text{idő}^{-1}]$

Példa:



Amennyiben a reakciósebesség a kísérletileg meghatározott $v = k[A]^\alpha [B]^\beta \dots [Z]^\omega$ alakban írható fel, akkor a reakció rendűségét az $\alpha + \beta + \dots + \omega$ összeggel definiáljuk. Az $\alpha, \beta, \dots, \omega$ kitevőket az adott A, B, \dots, Z komponensekhez tartozó részrendeknek nevezzük.

2. Elsőrendű reakciók



$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = -k \int_0^t dt$$

$$[A] = [A]_0 e^{-kt}, \text{ ahol } \dim(k) = \text{idő}^{-1}$$

Felezési idő: $t = t_{1/2}$, ha $[A] = \frac{1}{2}[A]_0$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

Általánosán: $t = t_{1/n}$, ha $[A] = \frac{1}{n}[A]_0$

$$t_{1/n} = \frac{\ln n}{k}$$

2.1. Példa: K8

Szulfuril-kloridot hevítenek zárt edényben 320 °C-on 1 bar kezdeti nyomással. Az $\text{SO}_2\text{Cl}_2 \rightarrow \text{SO}_2 + \text{Cl}_2$ reakció elsőrendű folyamat. 320 °C-on a sebességi állandó $k = 0,0792 \text{ h}^{-1}$.

- a) Számítsuk ki a százalékos bomlást 30 min reakcióidő után!
 b) Mennyi idő alatt bomlik el az SO_2Cl_2 90%-a és mekkora lesz a nyomás ekkor az edényben?
 (3,88%; 29,07 óra; 1,9 bar)

Megoldás:

$$k = 0,0792 \text{ h}^{-1} = 1,32 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1} = 2,2 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} \text{ és } \text{SO}_2\text{Cl}_2 = \text{A};$$

- a) Százalékos bomlás

$$\frac{[A]_0 - [A]}{[A]_0} \cdot 100\% = \left(1 - \frac{[A]}{[A]_0}\right) \cdot 100\% = \left(1 - \frac{[A]_0 \cdot e^{-kt}}{[A]_0}\right) \cdot 100\% = (1 - e^{-kt}) \cdot 100\% = \underline{\underline{3,88\%}}$$

- b) 90%-os bomláshoz szükséges idő és a nyomás

$$\frac{[A]_0 - [A]}{[A]_0} = 1 - \frac{[A]}{[A]_0} = 0,9 \Rightarrow [A] = 0,1[A]_0$$

$$[A] = [A]_0 e^{-kt} = 0,1[A]_0$$

$$-kt = \ln 0,1$$

$$kt = \ln 10 \Rightarrow t = \frac{\ln 10}{k} = \underline{\underline{29,07 \text{ h}}}$$

Koncentrációk a $t = 0 \text{ h}$ és a $t = 29,07 \text{ h}$ időpillanatban:

t/h	$[\text{SO}_2\text{Cl}_2]$	$[\text{SO}_2]$	$[\text{Cl}_2]$
0	$[A]_0$	—	—
29,07	$[A]$	$[P_1]$	$[P_2]$

A reakció sztöchiometriája szerint, ha $[A]_0 \Rightarrow$

$p = p_0$:

$$[A] = 0,1[A]_0 \mapsto 0,1p_0$$

$$[P_1] = 0,9[A]_0 \mapsto 0,9p_0$$

$$[P_2] = 0,9[A]_0 \mapsto 0,9p_0$$

$$1,9[A]_0 \mapsto 1,9p_0$$

Mivel $p_0 = 1 \text{ bar}$ és $[P_1]_0 = [P_2]_0 = 0$, így

$$\underline{\underline{p_{29,07\text{h}} = 1,9 \text{ bar.}}}$$

3. Másodrendű reakciók

3.1. $A + A \xrightarrow{k} P + \dots$, azaz $2A \xrightarrow{k} P + \dots$

$$v = k[A]^2 = -\frac{1}{2} \frac{d[A]}{dt} \Rightarrow \int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]^2} = -2k \int_0^t dt$$

$$\boxed{\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = 2kt} \quad \text{és} \quad \boxed{t_{1/2} = \frac{1}{2k[A]_0}}$$

$$\boxed{\dim(k) = [\text{koncentráció}^{-1} \text{idő}^{-1}]}$$

3.2. $A + B \xrightarrow{k} P + \dots$

$$v = k[A][B] = -\frac{d[A]}{dt}$$

$$[A] = [A]_0 - X \quad \text{és} \quad [B] = [B]_0 - X$$

$$-\frac{d[A]}{dt} = \frac{dX}{dt} = k([A]_0 - X)([B]_0 - X)$$

Tfh.: $[A]_0 \neq [B]_0$, valamint $X = 0$, ha $t = 0$

$$\int_0^t k dt = \int_0^X \frac{dX}{([A]_0 - X)([B]_0 - X)}$$

$$\boxed{kt = \frac{1}{[A]_0 - [B]_0} \ln \frac{([A]_0 - X)[B]_0}{([B]_0 - X)[A]_0}}$$

$$\boxed{kt = \frac{1}{[B]_0 - [A]_0} \ln \frac{([B]_0 - X)[A]_0}{([A]_0 - X)[B]_0}}$$

Általános eset: $\mu A + \nu B \xrightarrow{k} P + \dots$

$$\boxed{\frac{1}{\nu[A]_0 - \mu[B]_0} \ln \frac{([A]_0 - \mu X)[B]_0}{([B]_0 - \nu X)[A]_0} = kt}$$

Ha $[A]_0 = [B]_0$, akkor a fentiekhez hasonlóan:

$$\frac{dX}{dt} = k([A]_0 - X)^2$$

$$\int_0^t k dt = \int_0^X \frac{dX}{([A]_0 - X)^2} \Rightarrow \boxed{\frac{1}{[A]_0 - X} - \frac{1}{[A]_0} = kt} = \boxed{\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = kt}$$

3.3. Pszeudo-elsőrendű reakciók

Ha egy $A + B \xrightarrow{k} P + \dots$ reakcióban $[B]$ nagy feleslegben van $[A]$ -hoz képest, akkor $[B]$ mennyisége a reakció során állandónak tekinthető és a másodrendű sebességi egyenlet elsőrendűvé alakítható:

$$v = k [A] [B] = k [A] [B]_0 = k' [A], \text{ ahol } k' = k [B]_0 \text{ és } [B]_0 \gg [A]_0$$

Általánosan, bármely $v = k [A]^\alpha [B]^\beta \dots [Z]^\omega$ formában felírható reakcióban megállapítható egy kiválasztott komponensre vonatkozó részrend, ha a többi komponenst megfelelően nagy mennyiségben alkalmazzuk. Azaz

$$v = k' [A]^\alpha,$$

ahol α az A komponensre vonatkozó részrend, $k' = k [B]^\beta \dots [Z]^\omega$ és $[B]_0, \dots, [Z]_0 \gg [A]_0$

3.4. Példa: **K5** ($2 A \xrightarrow{k} P + \dots$)

A butadién dimerizálása ciklooktadiénné másodrendű reakció, amelynek sebességi állandója 500 K-en $1,43 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ h}^{-1}$. Egy 2 dm^3 -es edénybe 8 g butadiént bemérve mennyi idő alatt alakul át a 75%-a? (14,16 h)

Megoldás:

$2 C_4H_6 \xrightarrow{k} C_8H_{12}$, $C_2H_4 = A$ és $C_8H_{20} = B$, és a butadién moláris tömege: $M = 54 \text{ g/mol}$.

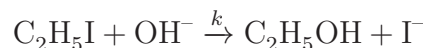
75%-os bomlásnál: $[A] = 0,25[A]_0$, ahol $[A]_0 = \frac{m}{V} = 0,0741 \text{ M}$, amiből $[A] = 0,01852 \text{ M}$.

$$\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = 2kt, \text{ amiből}$$

$$t = \frac{\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0}}{2k} = \underline{\underline{14,16 \text{ h}}}$$

3.5. Példa: **K4** ($A + B \xrightarrow{k} P + \dots$)

Az etil-jodid (A) alkoholos oldatban lúggal (B) másodrendű reakcióban ($v = k [A] [B]$) reagál:



10 dm^3 $0,1 \text{ mol/dm}^3$ -es etil-jodid és 5 dm^3 $0,25 \text{ mol/dm}^3$ -es lúgoldatot összeöntve 5 perc után az elegyben $0,025 \text{ mol/dm}^3$ -es jodid-koncentrációt határoztak meg. Mekkora a sebességi állandó?

($1,36 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ min}^{-1}$)

Megoldás:



$$t = 0 \text{ min : } \left. \begin{array}{l} n(A) = 1,00 \text{ mol} \\ n(B) = 1,25 \text{ mol} \end{array} \right\} \sum V = 15 \text{ dm}^3 \Rightarrow \begin{cases} [A]_0 = 0,067 \text{ M} \\ [B]_0 = 0,083 \text{ M} \end{cases} \text{ és } [I^-] = X = 0,025 \text{ M}$$

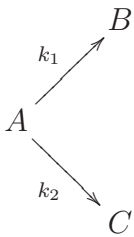
$$t = 5 \text{ min : } [A] = [A]_0 - X = 0,042 \text{ M}$$

$$[B] = [B]_0 - X = 0,058 \text{ M}$$

$$kt = \frac{1}{[B]_0 - [A]_0} \ln \frac{([B]_0 - X)[A]_0}{([A]_0 - X)[B]_0}$$

$$kt = \frac{1}{0,016 \text{ M}} \ln \frac{3,886 \times 10^{-3}}{3,486 \times 10^{-3}} = 6,879 \text{ M}^{-1} \Rightarrow \underline{\underline{k = 1,358 \text{ M}^{-1}\text{min}^{-1}}}$$

4. Párhuzamos reakciók



$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k_1[A] + k_2[A] = (k_1 + k_2)[A] = k'[A], \text{ ahol } k' = (k_1 + k_2)$$

$$[A] = [A]_0 e^{-k't} = [A]_0 e^{-(k_1+k_2)t}$$

Felezési idő: $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k_1 + k_2}$

Amennyiben $[B]_0 = [C]_0 = 0$, akkor egyrészt $\frac{k_1}{k_2} = \frac{[B]}{[C]}$,

másrészt minden t időpillanatban: $[A]_0 = [A] + [B] + [C]$.

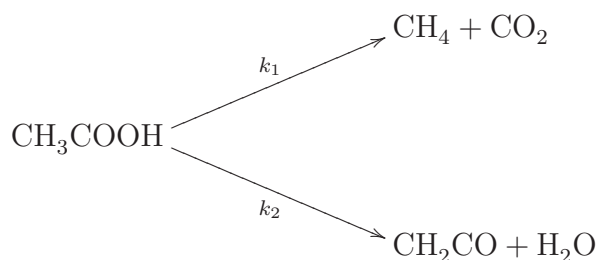
Ha tudjuk, hogy $[A] = [A]_0 \cdot e^{-(k_1+k_2)t}$, valamint $\frac{[B]}{[C]} = \frac{k_1}{k_2}$, amiből $[B] = \frac{k_1}{k_2}[C]$, akkor:

$$[A]_0 = [A] + [B] + [C] = [A]_0 \cdot e^{-(k_1+k_2)t} + \frac{k_1}{k_2}[C] + [C], \text{ amiből } [C]\text{-t kifejezve:}$$

$$[C] = [A]_0 (1 - e^{-(k_1+k_2)t}) \frac{k_2}{k_1 + k_2}, \text{ valamint } [C]_{max} = \lim_{t \rightarrow \infty} ([C]) = [A]_0 \frac{k_2}{k_1 + k_2}$$

4.1. Példa: K13

Az ecetsav magas hőmérsékleten (500-1000 °C között) szén-dioxidra és metánra, továbbá egyidejűleg keténre és vízre is bomlik:



Mindkét reakció elsőrendű, és 1189 K-en az első reakció sebességi állandója $3,74 \text{ s}^{-1}$, a másodiké $4,65 \text{ s}^{-1}$. Számítsuk ki, mennyi idő alatt reagál el az ecetsav 93 %-a, és maximálisan mennyi ketén nyerhető 1 mol/dm³ ecetsavból az adott körülmények között. (0,317 s, 0,554 mol/dm³)

Megoldás:

$\text{CH}_3\text{COOH} = \text{A}$; $\text{CH}_4 = \text{B}$; $\text{CH}_2\text{CO} = \text{C}$

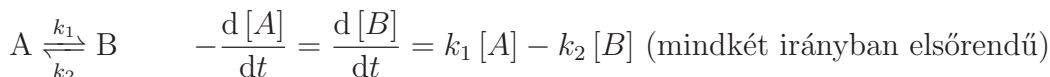
93%-os ecetsav fogyás esetén: $[A] = 0,07[A]_0$

$$0,07[A]_0 = [A]_0 \cdot e^{-(k_1+k_2)t} \Rightarrow t = \frac{-\ln 0,07}{k_1 + k_2} = \underline{\underline{0,317 \text{ s}}}$$

$[C]_{max} = ?$

$$\underline{\underline{[C]_{max}}} = [A]_0 \frac{k_2}{k_1 + k_2} = \underline{\underline{0,554 \text{ M}}}$$

5. Egyensúlyi reakciók



Tfh.: $[A]_0 > 0$, $[B]_0 = 0$. Ekkor $[A]_0 = [A] + [B] \Rightarrow [B] = [A]_0 - [A]$, amiből:

$$\frac{d[A]}{dt} + (k_1 + k_2)[A] = k_2[A]_0$$

$$[A] = \frac{[A]_0}{k_1 + k_2} (k_1 e^{-(k_1+k_2)t} + k_2) = \frac{k_2 [A]_0}{k_1 + k_2} \left(\frac{k_1}{k_2} e^{-(k_1+k_2)t} + 1 \right)$$

Egyensúlyban:

$$t = \infty, [A] = [A]_e \text{ és } [B] = [B]_e, -\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} = k_1 [A]_e - k_2 [B]_e = 0 \Rightarrow k_1 [A]_e = k_2 [B]_e$$

Egyensúlyi állandó:
$$K = \frac{[B]_e}{[A]_e} = \frac{k_1}{k_2}$$

$$[A]_e = \frac{k_2 [A]_0}{k_1 + k_2} \text{ és } [B]_e = \frac{k_1 [A]_0}{k_1 + k_2}$$

$$[A] = [B]_e e^{-(k_1+k_2)t} + [A]_e, \text{ amiből } \ln \frac{[A] - [A]_e}{[A]_0 - [A]_e} = -(k_1 + k_2) t$$

Ha $[B]_0 = 0$, akkor $[B] = [A]_0 - [A] = [A]_0 - [B]_e e^{-(k_1+k_2)t} - [A]_e$.

Mivel $[B]_e = [A]_0 - [A]_e$, így az előző képletből adódik, hogy $[B] = [B]_e (1 - e^{-(k_1+k_2)t})$

5.1. Példa: K14

A cis-sztilbén $\xrightleftharpoons[k_2]{k_1}$ trans-sztilbén átalakulás 594 K-en mindkét irányban elsőrendű és egyensúlyra vezet. Egy kísérletsorozatban a következő adatokat mérték:

t/s	0	667	1206	1768	∞
trans-%	0	42,8	62,5	74,9	93,2

Mekkora a két ellenkező irányú reakció sebességi állandója? ($k_1 = 3,09 \text{ h}^{-1}$, $k_2 = 0,225 \text{ h}^{-1}$.)

Megoldás:

cis $\xrightleftharpoons[k_2]{k_1}$ trans; elsőrendű folyamatok

k_1, k_2 ?

Egyensúlyban, $t \rightarrow \infty \Rightarrow [\text{trans}] \rightarrow [\text{trans}]_e, [\text{cis}] \rightarrow [\text{cis}]_e$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{[\text{trans}]_e}{[\text{cis}]_e} = \frac{93,2\%}{(100 - 93,2)\%} \approx 13,71; k_1 = 13,71 \cdot k_2$$

$$\ln \frac{[\text{cis}] - [\text{cis}]_e}{[\text{cis}]_0 - [\text{cis}]_e} = -(k_1+k_2)t \Rightarrow k_1+k_2 = \frac{-1}{t} \ln \frac{[\text{cis}] - [\text{cis}]_e}{[\text{cis}]_0 - [\text{cis}]_e} = \frac{-1}{667} \ln \frac{(100 - 42,8) - (100 - 93,2)}{100 - (100 - 93,2)} \approx 9,22 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1} = 13,71 \cdot k_2 + k_2$$

$$k_2 = \frac{9,22 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}}{14,71} \approx 6,27 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} = \underline{\underline{0,225 \text{ h}^{-1}}}$$

$$k_1 = 13,71 \cdot k_2 = \underline{\underline{3,09 \text{ h}^{-1}}}$$

6. Korszekutív reakciók

$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$ Tfh.: minden reakció elsőrendű és $[B]_0 = [C]_0 = 0$.

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1 [A], \text{ melynek megoldása: } [A] = [A]_0 e^{-k_1 t}$$

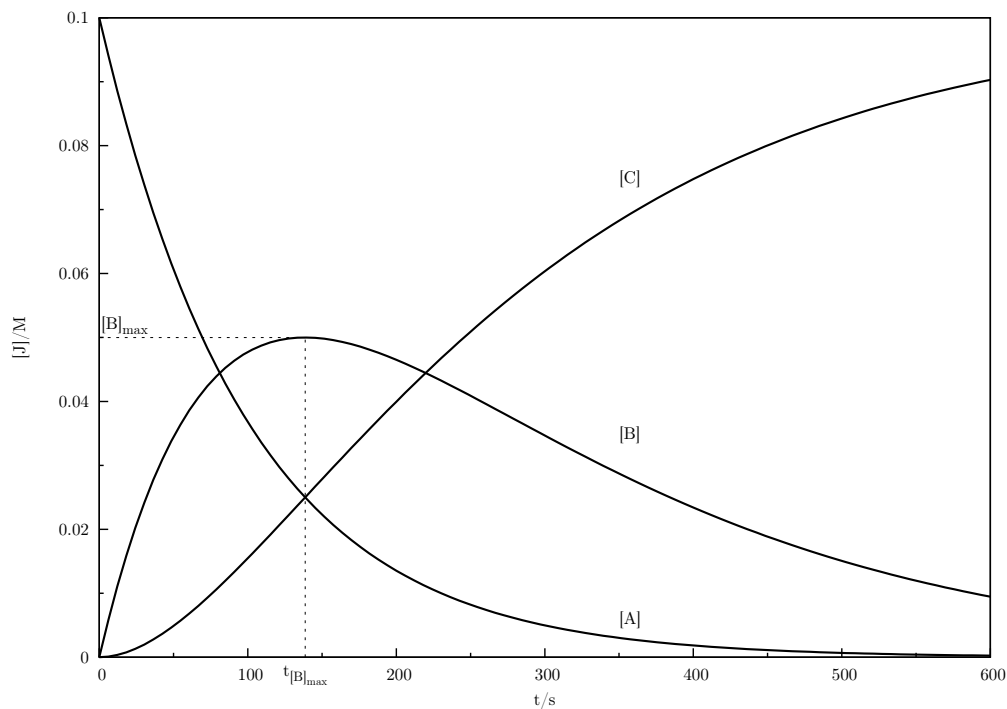
$$\frac{d[B]}{dt} = k_1 [A] - k_2 [B]$$

$$\frac{d[B]}{dt} + k_2 [B] = k_1 [A]_0 e^{-k_1 t}, \text{ melynek megoldása: } [B] = \frac{k_1 [A]_0}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t})$$

$[A]_0 = [A] + [B] + [C]$, amiből $[C] = [A]_0 - [A] - [B]$, melybe $[A]$ -t és $[B]$ -t behelyettesítve:

$$[C] = [A]_0 \left(1 - \frac{k_2}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} + \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_2 t} \right)$$

Mikor maximális $[B]$? ($t_{[B]_{\max}}$)



Ha $t = t_{[B]_{\max}}$, akkor $\frac{d[B]}{dt} = 0$

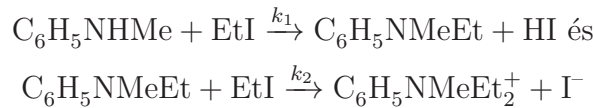
$$t_{[B]_{\max}} = \frac{\ln k_1 - \ln k_2}{k_1 - k_2}$$

és

$$[B]_{\max} = [A]_0 \left(\frac{k_1}{k_2} \right) \frac{k_2}{k_2 - k_1}$$

6.1. Példa: K15

Az N-metil-anilin etil-jodiddal a következő konszekutív reakciók szerint reagál:



Mindkét reakció pszeudo-elsőrendűnek tekinthető a nagy etil-jodid felesleg miatt. Mennyi idő után lesz a köztitermék mennyisége maximális? A kiindulási anyag hány %-a alakult ekkor köztiterméké ill. végterméké? Az N-metil-anilin felezési ideje 52,6 min, és $k_2/k_1 = 0,483$.

(107 min; 50,7% ill. 24,9%)

Megoldás:

$\text{C}_6\text{H}_5\text{NHMe} = \text{A}$; $\text{C}_6\text{H}_5\text{NMeEt} = \text{B}$; $\text{C}_6\text{H}_5\text{NMeEt}_2^+ = \text{C}$

$$\begin{aligned} t_{1/2}(\text{A}) = \frac{\ln 2}{k_1} &\Rightarrow k_1 = \frac{\ln 2}{t_{1/2}(\text{A})} = \underline{0,01318 \text{ min}^{-1}} \\ k_2 &= 0,483k_1 = \underline{0,006365 \text{ min}^{-1}} \\ \underline{\underline{t_{[B]_{max}}}} &= \underline{\underline{\frac{\ln k_1 - \ln k_2}{k_1 - k_2}}} = \underline{\underline{106,81 \text{ min}}} \end{aligned}$$

%-os átalakulás $t = 106,81$ min-nél:

$$[\text{B}] \text{ anyagra: } \frac{[\text{B}]}{[\text{A}]_0} \cdot 100\% = \frac{1}{[\text{A}]_0} \left[\frac{[\text{A}]_0 k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) \right] \cdot 100\% = \underline{\underline{50,67\%}} \text{ alakul } [\text{B}] \text{ köztiterméké.}$$

$$[\text{C}] \text{ anyagra: } \frac{[\text{C}]}{[\text{A}]_0} \cdot 100\% = \frac{[\text{A}]_0}{[\text{A}]_0} \left(1 - \frac{k_2}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} + \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_2 t} \right) \cdot 100\% = \underline{\underline{24,86\%}} \text{ alakul } [\text{C}] \text{ végterméké.}$$

7. Michaelis-Menten enzimkinetika



$$\frac{d[\text{ES}]}{dt} \approx 0 = k_1 [\text{E}] [\text{S}] - k_2 [\text{ES}] - k_3 [\text{ES}] \text{ és a teljes enzimkoncentráció: } [\text{E}]_0 = [\text{E}] + [\text{ES}].$$

A fentiekből adódik, hogy

$$[\text{ES}] = \frac{k_1}{k_2 + k_3} [\text{E}] [\text{S}] = \frac{1}{K_M} [\text{E}] [\text{S}], \text{ ahol } K_M = \frac{k_2 + k_3}{k_1} \text{ a Michaelis-állandó.}$$

$[E]$ -t kifejezve a teljes enzimkoncentrációból és behelyettesítve a fenti egyenletbe:

$$[E] = [E]_0 - [ES]$$

$$K_M [ES] = ([E]_0 - [ES]) [S]$$

$$[ES] (K_M + [S]) = [S][E]_0$$

$$[ES] = \frac{[S] [E]_0}{K_M + [S]}, \text{ amiből}$$

$$v = \frac{d[P]}{dt} = k_3 [ES] = \frac{k_3 [S] [E]_0}{K_M + [S]}$$

Ha $[S] \gg K_M$, akkor $v_{max} = k_3 [E]_0$ a maximális sebesség, ahol k_3 a maximális katalitikus ciklusszám.

Ha $[S] = K_M$, akkor $v = \frac{v_{max}}{2}$

7.1. Példa

Egy szubsztrátum enzim által katalizált átalakulásának Michaelis-állandója 25 °C-on 0,035 M. Amikor a szubsztrátum koncentrációja 0,01 M, a reakció sebessége $1,15 \cdot 10^{-3} \text{ Ms}^{-1}$. Mekkora a reakció maximális sebessége? ($5,175 \times 10^{-3} \text{ M/s}$)

Megoldás:

$$K_M = \frac{k_2 + k_3}{k_1} = 0,035 \text{ M}; [S] = 0,01 \text{ M}; v = 1,15 \times 10^{-3} \text{ M/s}$$

$$v = \frac{k_3 [E]_0 [S]}{K_M + [S]} \Rightarrow k_3 [E]_0 = \frac{v (K_M + [S])}{[S]} = \underline{\underline{5,175 \times 10^{-3} \text{ M/s}}}$$

8. Arrhenius-egyenlet

$$k(T) = Ae^{-E_a/RT}$$

$$\ln k(T) = \ln A - E_a/RT$$

A - preexponenciális tényező

E_a - aktiválási energia

R - egyetemes gázállandó

$\dim(A) = \dim(k)$

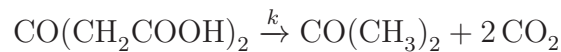
$\dim(E_a) = \text{energia/anyagmennyiség}$

Ha k ismert a T_1 és T_2 hőmérsékleten ($k(T_1) = k_1$ és $k(T_2) = k_2$):

$$\left. \begin{array}{l} \ln k_1 = \ln A - E_a/RT_1 \\ \ln k_2 = \ln A - E_a/RT_2 \end{array} \right\} \Rightarrow E_a = \frac{R(\ln k_1 - \ln k_2)}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}}$$

8.1. Példa: K11

Vizes oldatban az acetón-dikarbonsav elsőrend szerint bomlik:



A reakció felezési ideje 0°C -on 28200 s, 50°C -on 37 s. Mekkora az aktiválási entalpia? (97,4 kJ/mol)

Megoldás:

$$T_1 = 273,15 \text{ K}, t_{1/2}(k_1) = 28200 \text{ sec.}$$

$$T_2 = 323,15 \text{ K}, t_{1/2}(k_2) = 37 \text{ sec.}$$

$$E_a = ?$$

$$\text{Elsőrendű folyamatra } t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

$$k_1 = \frac{\ln 2}{t_{1/2}(k_1)} \approx \frac{\ln 2}{28200} \approx 2,46 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = \frac{\ln 2}{t_{1/2}(k_2)} \approx \frac{\ln 2}{37} \approx 1,87 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$E_a = \frac{R(\ln k_1 - \ln k_2)}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}} \approx 97406 \text{ J/mol} \approx \underline{\underline{97,4 \text{ kJ/mol}}}$$