

Anorganski Reakcijski Mehanizmi

SEMINAR

Nikola Bedeković

nbedekovic@chem.pmf.hr

Soba -029

1. Reakcija supstitucije



slijedi zakon brzine prvoga reda. Izračunajte:

- Koncentraciju klorido kompleksa nakon 3,50 min i 30,0 min ako je početna koncentracija kompleksa $15,0 \text{ mmol L}^{-1}$. Koeficijent brzine reakcije iznosi $k = 5,36 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. Skicirajte graf ovisnosti koncentracije reaktanta o vremenu.
- Vrijeme polureakcije
- Relaksacijsko vrijeme

2. Izvedite izraz za vrijeme polureakcije

a) unimolekulske reakcije drugog reda

b) reakcije nultog reda

te za obje vrste reakcija izvedite mjernu jedinicu koeficijenta brzine.

3. U svrhu određivanja zakona brzine reakcije



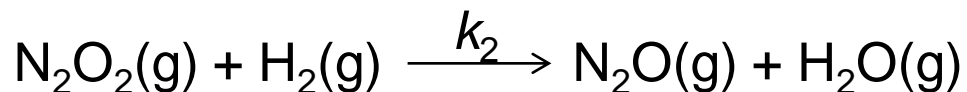
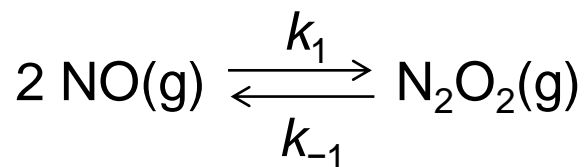
uz prisustvo Cu^{2+} iona izvedena je serija pokusa čiji su rezultati prikazani u tablici. Odredite red reakcije s obzirom na svaki od reaktanata i koeficijent brzine.

$c_0(\text{N}_2\text{H}_4) / \text{mol L}^{-1}$	$c_0(\text{H}_2\text{O}_2) / \text{mol L}^{-1}$	$c_0(\text{Cu}^{2+}) / \text{mol L}^{-1}$	$V(\text{N}_2) / \text{mL min}^{-1}$
$1,64 \cdot 10^{-2}$	$6,54 \cdot 10^{-2}$	$1,23 \cdot 10^{-6}$	7,3
$3,27 \cdot 10^{-2}$	$6,54 \cdot 10^{-2}$	$1,23 \cdot 10^{-6}$	7,4
$6,54 \cdot 10^{-2}$	$6,54 \cdot 10^{-2}$	$1,23 \cdot 10^{-6}$	7,4
$13,1 \cdot 10^{-2}$	$6,54 \cdot 10^{-2}$	$1,23 \cdot 10^{-6}$	7,2
$3,27 \cdot 10^{-2}$	$3,27 \cdot 10^{-2}$	$1,23 \cdot 10^{-6}$	3,6
$3,27 \cdot 10^{-2}$	$6,54 \cdot 10^{-2}$	$1,23 \cdot 10^{-6}$	7,4
$3,27 \cdot 10^{-2}$	$13,1 \cdot 10^{-2}$	$1,23 \cdot 10^{-6}$	15,0
$3,30 \cdot 10^{-2}$	$65,4 \cdot 10^{-2}$	$3,29 \cdot 10^{-7}$	1,95
$3,30 \cdot 10^{-2}$	$65,4 \cdot 10^{-2}$	$6,57 \cdot 10^{-7}$	4,10
$3,30 \cdot 10^{-2}$	$65,4 \cdot 10^{-2}$	$9,86 \cdot 10^{-7}$	6,20
$3,30 \cdot 10^{-2}$	$65,4 \cdot 10^{-2}$	$1,32 \cdot 10^{-6}$	8,30

4. Ispitivana je kinetika redukcije dušikovog(II) oksida vodikom pri 820 °C metodom početnih brzina (tablica) pri čemu je mjerena početna brzina reakcije za različite početne tlakove reagirajućih plinova.

pokus	Početni tlak / torr		$v / \text{torr s}^{-1}$
	NO	H ₂	
1	120,0	60,0	$8,66 \cdot 10^{-2}$
2	60,0	60,0	$2,17 \cdot 10^{-2}$
3	60,0	180,0	$6,62 \cdot 10^{-2}$

- a) Odredite zakon brzine i izračunajte koeficijent brzine reakcije
- b) Izračunajte početnu brzinu nestajanja NO, ako je početni tlak NO $2,00 \cdot 10^2$ torr, a vodika $1,00 \cdot 10^2$ torr.
- c) Predloženi mehanizam reakcije NO i H₂ je:

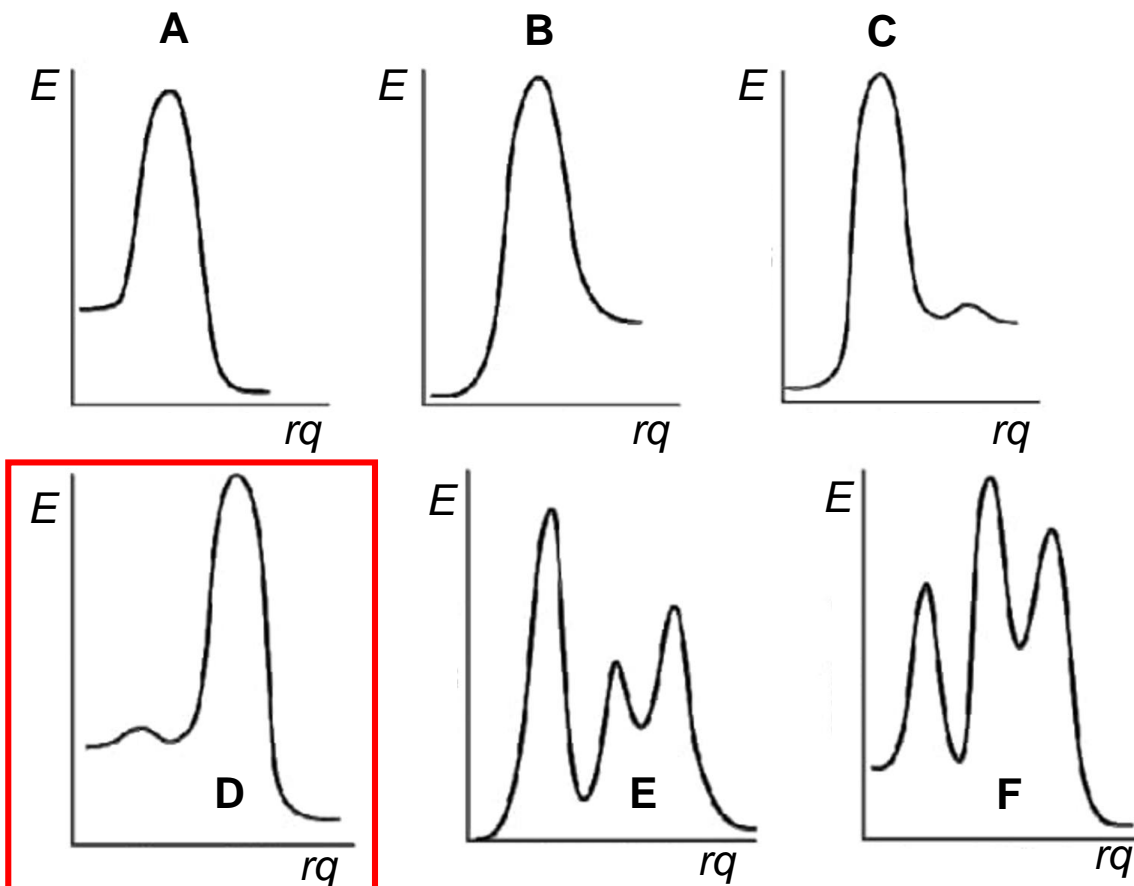


Izvedite zakon brzine nastajanja N₂O iz predloženog mehanizma.

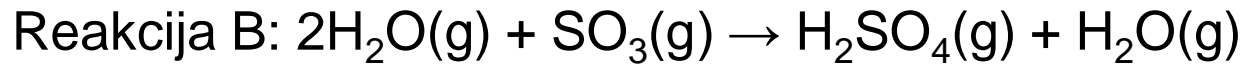
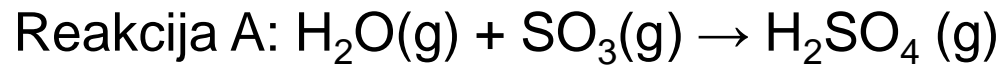
d) Pri kojim uvjetima je izvedeni zakon brzine ekvivalentan eksperimentalno određenome zakonu brzine?

e) Prikažite makroskopski koeficijent brzine kao funkciju mikroskopskih konstanti brzine.

f) Koji od prikazanih energijskih profila najbolje odgovara predloženome mehanizmu?

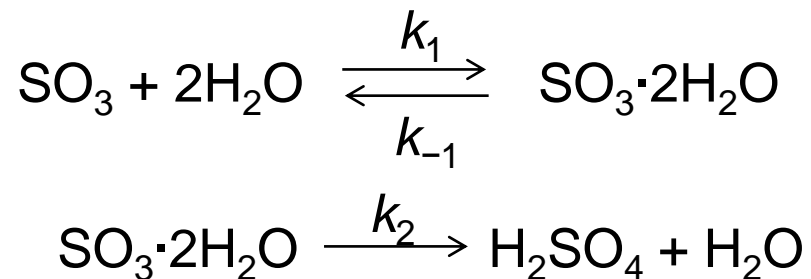


5. Nastajanje sumporne kiseline u atmosferi može se opisati dvjema mogućim reakcijama.



a) U okvirima teorije sudara odredite parcijalne i ukupne redove reakcija A i B.

b) Za reakciju B temeljem eksperimentalnih podataka predložen je sljedeći mehanizam pretvorbe:

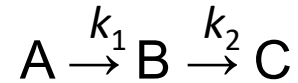


Iz predloženog mehanizma izvedite zakon brzine nastajanja sumporne kiseline te odredite parcijalne i ukupan red reakcije.

c) Energije aktivacije za reakcije A i B iznose redom $E_{a,A} = +80,0 \text{ kJ mol}^{-1}$ i $E_{a,B} = -20,0 \text{ kJ mol}^{-1}$. Poznato je da je nastajanje sumporne kiseline puno brže u višim slojevima atmosfere ($T = 175 \text{ K}$), nego na površini zemlje ($T = 300 \text{ K}$).

Koja od reakcija dominira u višim slojevima atmosfere?

6. Izračunajte vrijeme potrebno za postizanje maksimalne koncentracije međuprodukta u reakciji koja se odvija mehanizmom:



ako se koncentracija međuprodukta mijenja s vremenom prema izrazu:

$$c_{B,t} = \frac{c_{A,0} \cdot k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t})$$

a koeficijenti brzina su $k_1 = 2,53 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ i $k_2 = 2,53 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$.

7. Izvedite zakon brzine za redukciju acetaldehida u etan, ako se ona odvija sljedećim mehanizmom:

