

① a) $v_{rms} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} = \sqrt{\frac{3 \cdot 8,3145 \cdot 298}{2 \cdot 10^{-3}}} = 1928 \text{ m/s}$ (p. 933)

↳ M in kg/mol! Niet g/mol

b) $A = 1 \text{ cm}^2 = 10^{-4} \text{ m}^2$

$P_{H_2} = 1 \text{ atm} = 101325 \text{ Pa}$

$T = 298 \text{ K}$

$M = 2 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$

$Z_c = \frac{P_{NA}}{(2\pi MRT)^{1/2}}$ (collisional flux)

$Z_c = \frac{dN_c/dt}{A} \Rightarrow \frac{dN_c}{dt} = Z_c \cdot A$

(p. 935)

$Z_c = \frac{101325 \cdot 6,022 \cdot 10^{23}}{(2\pi \cdot 2 \cdot 10^{-3} \cdot 8,3145 \cdot 298)^{1/2}} = 1,09 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$

$\frac{dN_c}{dt} = 1,09 \cdot 10^{28} \cdot 10^{-4} = 1,09 \cdot 10^{24} \text{ s}^{-1}$

② a) Raoult: als $x_i \rightarrow 1$ ("pure" oplossing) dan ideal solution!

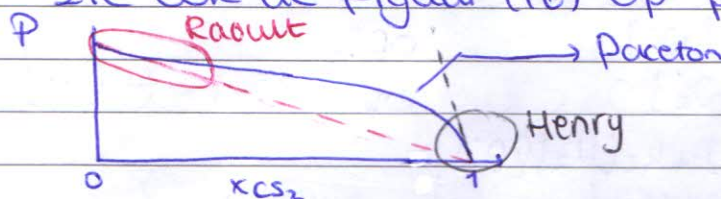
• Gebruikt dampdruk van pure component: $P_i = x_i P_i^*$ (p. 244)

• Alleen als A-A, B-B en A-B interacties even sterk zijn

Henry: als $x_i \rightarrow 0$ (verdunde oplossing)

• Gebruikt constante van Henry: $P_i = x_i K_H^i$ (p. 262)

Zie ook de figuur (1b) op p. 262: CS_2 en aceton



Raoult region: bijna alleen
maar aceton aanwezig ($x_{\text{CS}_2} \sim 0$)
Henry region: bijna geen aceton
aanwezig ($x_{\text{CS}_2} \sim 1$)

b) $x_A = 0,40$ $P_{\text{tot}} = 73,0 \text{ Torr}$

$P_A^* = 108,4 \text{ Torr}$

Berekenen: y_A en P_B^*

Neem aan: Raoult geldt.

$P_A = x_A P_A^* = 0,40 \cdot 108,4 = 43,4 \text{ Torr}$

$P_{\text{tot}} = P_A + P_B \rightarrow P_B = P_{\text{tot}} - P_A = 73,0 - 43,4 = 29,6 \text{ Torr}$

$P_B = x_B P_B^* \rightarrow P_B^* = \frac{P_B}{x_B} = \frac{29,6}{(1-0,4)} = 49,4 \text{ Torr}$

$y_A = \frac{P_A}{P_{\text{tot}}} = \frac{43,4}{73,0} = 0,59$ (Dus $y_B = 0,41$)

c) 1. Dissociatie-energie van $\text{Cl}_2 \rightarrow \text{Cl (g)}$ = endotherm (positief)

2. Energie om van Cl (g) een anion, Cl^- , te maken: ionisatie-energie = exotherm (negatief)

3. Solvatatie-energie van Cl^- = ~~endotherm (positief)~~ exotherm (negatief)

d) Voor water geldt: $K = 3,29 \cdot 10^9 \sqrt{\text{I}} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ bij 298 K. Dus $\frac{1}{K} = \frac{1}{3,29 \cdot 10^9 \sqrt{\text{I}}}$

$\text{I} = \frac{m}{2} (v_+ z_+^2 + v_- z_-^2)$ waarbij m = molaliteit = mol/kg (niet mol/L!)

$M = 0,1 \text{ mol/L water} = 0,1 \text{ mol/kg water} = m$ ($\rho_{\text{water}} = 1 \text{ kg/L}$)

$\text{I} = \frac{0,1}{2} (1 \cdot 2^2 + 2 \cdot 1^2) = 0,05 \cdot 6 = 0,3 \text{ mol/kg}$

$\frac{1}{K} = \frac{1}{3,29 \cdot 10^9 \cdot \sqrt{0,03}} = 5,55 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 5,6 \text{ \AA}$ (p. 287+288)

e) f_{\pm} uit de DH-theorie is lager dan de echte gemiddelde f_{\pm} .
 (p. 289) In het echt zijn er ook repulsieve interacties tussen de ionen in de elektrolyt. Dit verhoogt de energie van de oplossing en dus f_{\pm} .

③ a) Stap 1, ten eerste omdat er hier een radicaal wordt gevormd (relatief onstabiel dus energetisch ongunstig); ten tweede omdat deze reactie meer elementaire stappen heeft.

b) $\frac{d[H_2]}{dt} = -k_1 [H_2][O_2] - k_2 [H_2][O^{\cdot}]$ (p. 985)

$$\frac{d[O_2]}{dt} = -k_1 [H_2][O_2]$$

$$\frac{d[H_2O]}{dt} = +k_1 [H_2][O_2] + k_2 [H_2][O^{\cdot}]$$

$$\frac{d[O^{\cdot}]}{dt} = +k_1 [H_2][O_2] - k_2 [H_2][O^{\cdot}]$$

c) Steady-state-benadering: $\frac{d[O^{\cdot}]}{dt} = 0$ (p. 999)

$$\Rightarrow k_1 [H_2][O_2] = k_2 [H_2][O^{\cdot}]$$

$$\Rightarrow k_1 [O_2] = k_2 [O^{\cdot}]$$

$$\Rightarrow [O^{\cdot}] = \frac{k_1}{k_2} [O_2]$$

$$\text{of: } [O_2] = \frac{k_2}{k_1} [O^{\cdot}]$$

$$\frac{d[H_2O]}{dt} = k_1 [H_2][O_2] + k_2 [H_2][O^{\cdot}]$$

$$= k_1 [H_2][O_2] + k_2 [H_2] \frac{k_1}{k_2} [O_2] \quad / \quad = k_1 [H_2] \frac{k_2}{k_1} [O^{\cdot}] + k_2 [H_2][O^{\cdot}]$$

$$= k_1 [H_2][O_2] + k_1 [H_2][O_2] \quad / \quad = k_2 [H_2][O^{\cdot}] + k_2 [H_2][O^{\cdot}]$$

$$\frac{d[H_2O]}{dt} = 2k_1 [H_2][O_2] \quad / \quad = 2k_2 [H_2][O^{\cdot}]$$

$$\left. \begin{aligned} [O_2] &= [O_2]_0 [H_2]_0 e^{-k_1 t} & ; & [H_2] = [H_2]_0 [O_2]_0 e^{-k_1 t} \\ \Rightarrow \frac{d[H_2O]}{dt} &= 2k_1 [H_2][O_2]_0 [H_2]_0 e^{-k_1 t} + [H_2]_0 [O^{\cdot}]_0 e^{-k_2 t} \end{aligned} \right\}$$

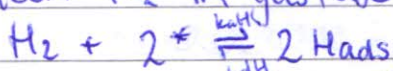
d) Arrhenius: $k = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = A \cdot \exp\left(-\frac{E_{act}}{RT}\right)$ (p. 1003)

$$k(298) = 4,1 \cdot 10^{13} \exp\left(-\frac{211,2 \cdot 10^3}{8,3145 \cdot 298}\right) = 3,92 \cdot 10^{-24} \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$k(1000) = 4,1 \cdot 10^{13} \exp\left(-\frac{211,2 \cdot 10^3}{8,3145 \cdot 1000}\right) = 381 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

Eenheid rate constants: zie p. 985 table 1. Dit is 2^e orde overall!

e) Alleen H₂ in gasfase:



$$\frac{d\theta_H}{dt} = k_{adH} P_{H_2} (1 - \theta_H)^2 \quad \text{voor adsorptie}$$

$$\frac{d\theta_H}{dt} = -k_{desH} N \theta_H^2 \quad \text{voor desorptie}$$

dus dekkingsgraad
 → verandert niet!

In evenwicht geldt dat $\left(\frac{d\theta_H}{dt}\right)_{ads} = -\left(\frac{d\theta_H}{dt}\right)_{des}$, dus

$$k_{adH} P_{H_2} (1 - \theta_H)^2 - k_{desH} N \theta_H^2 = 0$$

H3b,
 we 5
 vraag 4

