

Opgave II (Kinetik)

I atmosfæren kan ozon, O_3 , og atomart oxygen, O , omdannes direkte til dioxygen, O_2 , ved elementarreaktionen



eller, hvis der også forefindes chloratomer, ved to-trinsmekanismen:



For hver af de bimolekylære elementarreaktioner (2),(3) og (4) kan man i Tabel 2 finde værdierne af den præeksponentielle faktor, A , samt aktiveringsenergien, E_a , divideret med gaskonstanten, R .

Tabel 2. Præeksponentielle faktor og aktiveringsenergi for (2), (3) og (4)

Reaktion	Hastighedskonstant	$A / \text{mol}^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	$\frac{E_a}{R} / \text{K}$
(2)	k_2	1.1×10^7	2300
(3)	k_3	3.0×10^7	140
(4)	k_4	6.6×10^7	220

Tabel 3 indeholder de omtrentlige værdier for koncentrationerne af henholdsvis atomart oxygen, O , og ozon, O_3 , i ca. 40 km's højde:

Tabel 3.

Komponent	Koncentration $c / \text{mol m}^{-3}$
O	1×10^{-9}
O_3	1×10^{-6}

Vi betragter først ozonnedbrydningen uden chlor og i 40 km's højde, hvor temperaturen er 250 K. Reaktionshastigheden for reaktionen (2) med hastighedskonstanten k_2 , defineres som $v_2 = -d[O]/dt$.

8) Beregn værdien (inklusive enhed) af v_2 .

Vi betragter nu det tilfælde, hvor der er chloratomer (muligvis hidrørende fra dissocieret

freon 12, dvs. CF_2Cl_2) til stede. Vi indfører den totale koncentration af frit og bundet chlor: $L = [\text{Cl}] + [\text{ClO}]$. Reaktionshastigheden v_4 for reaktionen (4) vil da være givet ved udtrykket:

$$v_4 = -\frac{d[\text{O}]}{dt} = \frac{k_3 k_4 L [\text{O}] [\text{O}_3]}{k_3 [\text{O}_3] + k_4 [\text{O}]} \quad (5)$$

9) Bevis ligning (5) ved at antage, at koncentrationen af ClO er stationær.

Når man indsætter data fra Tabel 2 og Tabel 3 i ligning (5), viser det sig, at man med god tilnærmelse kan se bort fra det ene af leddene i nævneren.

10a) Opskriv det udtryk, som ligning (5) under de gældende forhold kan simplificeres til.

10b) Angiv hvorvidt det hastighedsbestemmende trin er reaktion (3) eller reaktion (4). Svaret **skal** begrundes.