

Kimika Fisika: 2. Partziala



Xabier Lopez, Ekainak 12 2001

Oharra: 2. partziala dutenek azterketa osoa egin behar dute. Azterketa finala dutenek 1.2 ($^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ Espektrua) eta 2.1 (Ozonoaren deskonposaketa Naturala) galderak egin behar dituzte.

1 Espektroskopia

1.1 Espektrua noiz? (2 puntu)

- (1/2 puntu) Molekula hauen artean, esan zein aurkeztuko dute mikrouhin espektrua eta zergatik: a) H_2 ; b) HCl ; c) CH_4 ; d) H_2O eta e) NH_3
- (1/2 puntu) Molekula hauen artean, esan zein aurkeztuko dute infragorri espektrua eta zergatik: a) CH_3CH_3 ; b) H_2 ; c) HCl ; d) CH_4 ; eta e) NH_3
- (1/2 puntu) Molekula hauen artean, esan zein aurkeztuko dute Raman espektru errotazionala eta zergatik: a) CH_2Cl_2 ; b) CH_3CH_3 ; c) SF_6 ; d) H_2 ; eta e) CH_4
- (1/2 puntu) Molekula zentrosimetrikoetan, zein trantsizio elektronikoko posible dira paritatea kontutan hartuz? Zergatik?

1.2 $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ Espektrua (3 puntu)

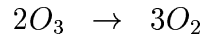
$^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ molekula estudiantu da infragorri espektroskopiaz. Molekula hau errotadore zurruna eta osziladore harmonikotzat har dezakegu. Demagun molekularen egoera bakarra (edo populatuena), egoera bibrazional fundamentalak eta $J=3$ egoera errotazionalak dela. Absortzio infragorri espektrua egitean bi trantsizio neurtu ditugu: 3075.7 cm^{-1} -ean eta 2927.5 cm^{-1} -ean. Kontsideratu maila bibrazional guztiak konstante errotazional berdinak dituztela. Kalkula ezazu:

- (1 puntu) $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ molekularen lotura distantzia (R_e)
- (1 puntu) $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ loturaren indar konstantea (k_f)
- (1 puntu) Hidrogenoa Deuterio isotopoarekin ordezkatzeko dugu, eta molekula berriaren (hots, $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$) mikrouhin espektroa egiten dugu. $J=1 \leftarrow 0$ trantsizio errotazionala 10.7840 cm^{-1} -ean neurtzen dugu. Informazio honetan oinarriturik, esan al dezakezu $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$ -k eta $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ -k lotura distantzia berdina duten ala ez? Kalkulatu $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ eta $^2\text{H}^{35}\text{Cl}$ -aren zero puntuko energi bibrazionalak. Berdinak al dira?

2 Zinetika

2.1 Ozonoaren deskonposaketa Naturala (2 puntu)

Naturan Ozonoa (O_3) deskonposa daiteke oxigenoa emateko:

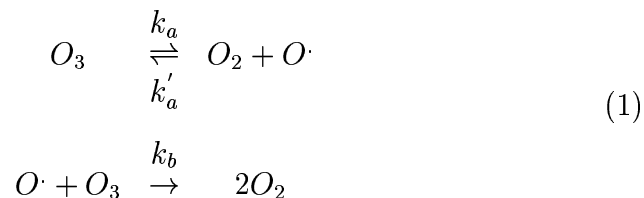


Zinetika aldetik, erreakzio honek bi portaera limite aurkezten ditu:

- **a kasua:** Erreakzioa 1. ordenekoa da Ozonoaren kontzentrazioarekiko.
- **b kasua:** Erreakzioa 2. ordenekoa da Ozonoaren kontzentrazioarekiko.

Hurrengo galderak erantzun:

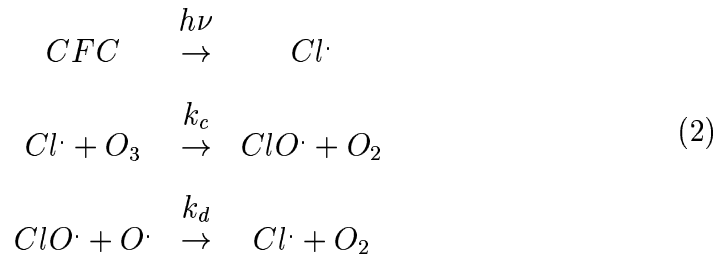
- (1 puntu) Adieraz ezazu zein baldintzapean izango dugun kasu bat edo bestea, mekanismoa hurrengo baldin bada, eta biterkariari egoera egonkorren hurbilketa aplikatu daitekeela kontsideratuz:



- (1/2 puntu) Zein izango da Ozonoaren erdibizitza **a) kasuan** ?
- (1/2 puntu) Ozonoaren kontserbazioaren ikuspuntutik, zein da mekanismo honek aurkezten duen aspektu positiboa?

2.2 Ozonoaren deskonposaketa molekula klorofluorokarbonodunengatik (CFC) (3 puntu)

Zoritzarrez, azken urteetan ikusi dugu, gizakiak sortutako zenbait molekulak ozonoaren degradazioan eragina badutela. Hauek molekula klorofluorokarbonodunak (CFC) dira. Molekula hauek oso egonkorak dira baldintza normalean, baina estratosferan, ultramorezko fotoiak aurkitzean, hauek absorbatzen ditu $Cl\cdot$ erradikala askatuz. $Cl\cdot$ ozonoaren deskonposaketaren katalizatzailea da, mekanismoa hurrengo izanik,



Adieraz ezazu

- (1 puntu) Zein da Ozonoaren kontzentrazioaren denborarekiko dependentzia? Kontsideratu egoera egonkorren hurbilketa aplikatu dagoen biterkari bakarrari.

- (1/2 puntu) Zein da ozonoaren erdibizitza?
- (1/2 puntu) Erdibizitzak analizatuz, auresan zer baldintzapean ozonoaren deskonposaketa deskonposaketa naturala baino azkarragoa izango den. Erlaziorik ba al dago absorbatutako ultramore argi intentsiatearekin (I)?
- (1 puntu) Demagun erreakzio elemental hauek Arrhenius portaera dutela. Kalkulatu I-ren balio minimoa Ozonoaren deskonposaketa (erdibizitzaz neurtuta) CFC mekanismoagatik azkarrago gertatzeko mekanismo naturalagatik baino. Temperatura 298 K-koa da.

Erreakzioa	A (s ⁻¹)	E _a (kJ mol ⁻¹)
$O_3 \rightarrow O_2 + O\cdot$	3.5×10^{13}	100
Erreakzioa	A (L mol ⁻¹ s ⁻¹)	E _a (kJ mol ⁻¹)
$Cl\cdot + O_3 \rightarrow ClO\cdot + O_2$	8.0×10^{10}	24