

問題 8 簡単な衝突理論

気相での素反応 $\text{H} + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5$ では、二次の反応速度定数は温度変化に対して次表のように変化する：

T / K	198	298	400	511	604
$k \times 10^{12} / \text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$	0.20	1.13	2.83	4.27	7.69

- a) このデータを使って、この反応に対する活性化エネルギー E_a および指数項にかかる係数 A を計算せよ。

(訳注：アレニウス式 ($k = A \exp(-E_a/(RT))$) を参照。)

二分子反応の簡単な衝突理論は、反応速度定数に対して次式を与える：

$$k = \sigma \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu}} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

(訳注： $\exp(x) = e^x$)

この式で、 μ は反応物の換算質量、 σ は反応断面積である。

- b) 上式の三つの因子、 σ 、指数項、および平方根の項の役割を説明せよ。
- c) 小問(a)に対する答えを使って、400 K の反応に対する σ を求めよ。
- d) 小問(c) で得られた値と、(他の実験データにより) 衝突断面積として見積もられた値 $4.0 \times 10^{-19} \text{ m}^2$ とを比較せよ。