

Odpovědník 11 – Teorie tranzitního stavu

1. (3 body)

Reakce $\text{NO} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{NOCl} + \text{Cl}$, charakterizovaná pro uvedený směr rychlostním koeficientem k , probíhá v plynné fázi kinetikou druhého řádu. Arrheniovske parametry této reakce jsou: $A = 4.0 \times 10^9 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$, $E_a = 85 \text{ kJ mol}^{-1}$. O kolik K musíme zahřát reakční směst z teploty 100°C , aby se rychlostní koefecient reakce zvětšil třikrát?

- (a) o 4 K
- (b) o 8 K
- (c) o 16 K
- (d) o 32 K

2. (1 bod)

Teoretické zdůvodnění exponenciální závislosti reakční rychlosti na aktivační energii se zakládá na

- (a) Boltzmannově statistice
- (b) časově závislé Schroedingerově rovnici
- (c) vlastnosti partiční funkce pro reakční koordinátu
- (d) rozpadu aktivovaného komplexu kinetikou prvního řádu

3. (1 bod)

Reakční koordináta

- (a) má maximum pro aktivovaný komplex
- (b) prochází sedlovým bodem prvního řádu
- (c) je závislostí energie na nejpravděpodobnější reakční cestě
- (d) je určena pohybem jader spojeným s nejmenšími energetickými nároky

4. (3 body)

Reakce má rychlostní koefecient 23 krát větší při 110°C než při 65°C . Aktivační energie této reakce je

- (a) 57 kJ mol^{-1}
- (b) 75 kJ mol^{-1}
- (c) 89 kJ mol^{-1}
- (d) 98 kJ mol^{-1}

5. (1 bod)

Přisoudíme-li procesu aktivace $\Delta_r G^{\ddagger 0}$, můžeme Eyringovu rovnici pro rychlostní koeficient k_{ef} elementární bimolekulární reakce ideálních plynů napsat ve tvaru (k je Boltzmannova konstanta)

$$a) k_{ef} = \kappa \frac{kT}{h} \frac{RT}{p^0} \exp\left(\frac{\Delta_r S^{\ddagger 0}}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta_r H^{\ddagger 0}}{RT}\right)$$

$$b) k_{ef} = \kappa \frac{kT}{h} \frac{RT}{p^0} \exp\left(\frac{\Delta_r S^{\ddagger 0}}{R}\right) \exp\left(-\frac{\Delta_r H^{\ddagger 0}}{RT}\right)$$

$$c) k_{ef} = \kappa \frac{h}{kT} \frac{RT}{p^0} \exp\left(\frac{\Delta_r S^{\ddagger 0}}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta_r H^{\ddagger 0}}{RT}\right)$$

$$d) k_{ef} = \kappa \frac{h}{kT} \frac{RT}{p^0} \exp\left(\frac{\Delta_r S^{\ddagger 0}}{R}\right) \exp\left(-\frac{\Delta_r H^{\ddagger 0}}{RT}\right)$$

6. (1 bod)

Eyringova teorie interpretuje Arrhenův předexponenciální faktor pomocí standardní aktivační

- a) enthalpie
- b) entropie
- c) Gibbsovy energie
- d) Eyringovy energie