

STATISTICKÁ TERMODYNAMIKA A CHEMICKÁ KINETIKA V GRAFECH

Důležité konstanty:

$$k = 1.3806488 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$$

$$h = 6.62606957 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

$$c = 2.99792458 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

Úkol č. 1

Čemu je ve statistické termodynamice rovno β a jaká bude její hodnota při teplotě 25 °C? [$\beta = 2.4293 \cdot 10^{20} \text{ J}^{-1}$]

Úkol č. 2

Vyhodnoťte a porovnejte 8! s využitím a) definice faktoriálu b) Stirlingovy aproximace.
[a) 40 320, b) $5.63 \cdot 10^3$]

Úkol č. 3

Vypočtěte váhu konfigurace a) 16 objektů rozmístěno dle schématu 0, 1, 2, 3, 8, 0, 0, 0, 0, 2 a b) 21 objektů rozmístěno podle 6, 0, 5, 0, 4, 0, 3, 0, 2, 0, 0, 1. S využitím Boltzmannova vztahu vypočtěte entropii pro obě konfigurace. Obě situace graficky znázorněte [a) $W = 21\,621\,600$, $S = 2.3318 \cdot 10^{-22} \text{ J K}^{-1}$, b) $W = 2.0532 \cdot 10^{12}$, $S = 3.9142 \cdot 10^{-22} \text{ J K}^{-1}$]

Úkol č. 4

Vzorek složený z pěti molekul má celkovou energii 5ε . Každá z molekul je schopna obsadit stavy s energiemi $j\varepsilon$, $j = 0, 1, 2, \dots$ a) Vypočtěte váhu konfigurace, ve které jsou molekuly rozloženy rovnoměrně po dostupných stavech. b) Vytvořte tabulku, v níž v záhlaví sloupců budou energie stavů a v řádcích budou vypsány všechny konfigurace, které jsou konzistentní s celkovou energií. Vypočítejte váhy všech konfigurací a určete nejpravděpodobnější z nich. [{2, 2, 0, 1, 0, 0} a {2, 1, 2, 0, 0, 0}]

Úkol č. 5

Jaká je relativní populace stavů dvouhladinového systému za nekonečné teploty? Jaký je vliv teploty na distribuci částic? [$N_1/N_0 = 1$]

Úkol č. 6

Jaká je teplota dvouhladinového systému s hladinami vzdálenými o energii ekvivalentní 400 cm^{-1} , jestliže je populace horního stavu třetinou stavu dolního?

[$T = 524 \text{ K}$]

Úkol č. 7

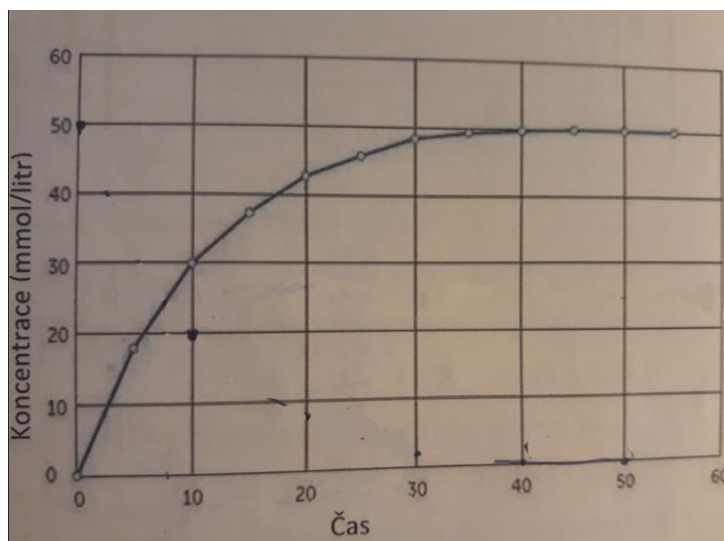
Určitá molekula má nedegenerovaný vzbuzený (excitovaný) stav ležící 540 cm^{-1} nad nedegenerovaným základním stavem. Při jaké teplotě bude 10 % v excitovaném stavu?

[$T = 354 \text{ K}$]

Úkol č. 8

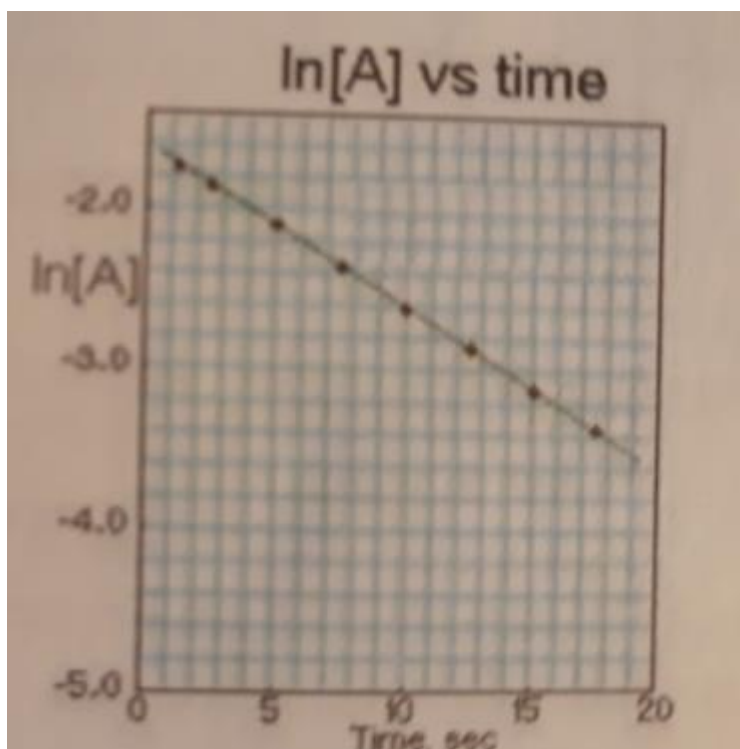
Pro reakci typu $A \longrightarrow P$ je v znik produktu P znázorněn následujícím grafem.

- Vyznačte počáteční koncentraci $[A_0]$ reaktantu.
- Do grafu vyznačte koncentrace $[A]$ reaktantu A v časech $t = 10 \text{ s}$, 20 s , 30 s , 40 s , 50 s a jejich spojením vyznačte časový vývoj reaktantu A.
- Kolika sekundám je přibližně roven poločas reakce $t_{1/2}$?
- Jedná se o kinetiku 1. řádu. Napišτε rychlostní rovnici v diferenciálním tvaru.



Úkol č. 9

Graf níže ukazuje závislost přirozeného logaritmu okamžité koncentrace látky A na čase pro kinetiku 1. řádu. Jak vypadá integrovaný tvar rychlostní rovnice? Dále určete velikost rychlostní konstanty k_r .



Úkol č. 10

Přiložený obrázek ukazuje návod na výpočet okamžité reakční rychlosti pomocí tečen ke grafu závislosti koncentrace na čase. Určete okamžité rychlosti reakce pomocí poměru změny koncentrace za čas v každém z těchto bodů.

