

1. Chemická kinetika I

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. Arrheniovské parametry této reakce jsou: $A = 4.0 \times 10^9 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$, $E_a = 85 \text{ kJ mol}^{-1}$.

- (a) Vyjádřete pomocí aktuální koncentrace oxidu dusnatého, $[\text{NO}]$, čemu v každém okamžiku reakce rovno (1 bod)

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} =$$

- (b) V rovnici (a) separujte na levou stranu členy závislé na koncentraci, na pravou stranu členy zbylé: (1 bod)

- (c) Zintegrujte rovnici získanou v (b). Na základě toho zapište, čemu je rovno

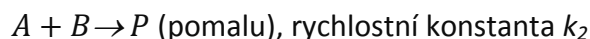
$$\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} =$$

(2 body)

- (d) Vypočtete, o kolik K musíme zahřát reakční směs z teploty 100°C , aby se rychlostní koeficient reakce zvětšil třikrát? (3 body)

2. Chemická kinetika II

Reakční mechanismus



zahrnuje meziproduct A.

- (a) Za předpokladu předřazené rovnováhy vyjádřete K pomocí $[A]$ a $[A_2]$. [2 body]

- (b) Z části (a) vyjádřete $[A]$ pomocí K a $[A_2]$. [1 bod]

(c) Rychlostní rovnici pro rychlost určující krok mechanismu vyjádřete, čemu je rovno —

[1 bod]

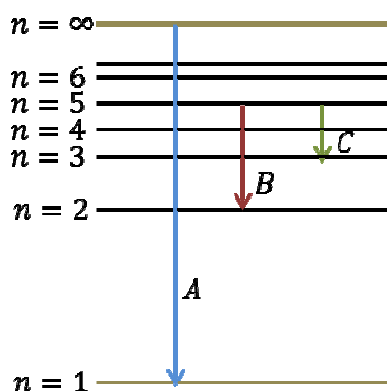
(d) Pokud jste již neprovedli v bodě (c), dosadte do rovnice (c) vyjádření pro [A] získané výše a odvoďte efektivní rychlostní konstantu k_{eff} celkového mechanismu. [2 body]

3. Hladiny energie v atomech

Následující obrázek představuje spektrum hladin energie pro atom vodíku. (Rozestupy mezi hladinami energie pro $n=4$ a vyšší jsou z grafických důvodů větší, než ve skutečnosti.)

Energie (eV):

Atomové orbitály pro dané n :



(a) Do obrázku dokreslete, kde se na škále energie nachází kontinuum stavů. [1 bod]

(b) Na levou stranu obrázku doplňte energie (v eV) hladin s $n=1$, $n=2$ a $n=3$. [3 body]

Prostor pro výpočet:

(c) Pro který z přechodů A, B, C bude **energie** vyzářeného fotonu **největší**? **Vypočtěte ji.** [1 bod]

(d) Pro který z přechodů A, B, C bude **vlnová délka** vyzářeného fotonu **největší**? **Vypočtěte ji.** [1 bod]

(e) Kolikrát nižší je energie elektronu v základním stavu iontu He^+ v porovnání s energií elektronu v základním stavu atomu H? [1 bod]

(f) Na pravou stranu obrázku doplňte k hladinám energie s $n=1$, $n=2$, a $n=3$ spektroskopická označení **všech** atomových orbitalů ($1s$, $2p_x$ atd.), které dotyčným hladinám přísluší.

[2 body]

(g) Kolik atomových orbitalů přísluší pro atom vodíku hladině s $n=4$?

[1 bod]

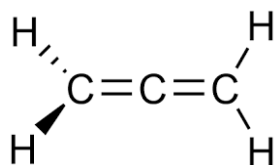
4. Symetrie molekul.

a) Zakreslete všechny prvky symetrie molekuly H_2O a správně je označte.

[2 body]

b) Zakreslete všechny prvky symetrie molekuly allenu, C_3H_4 (dvě roviny CH_2 jsou v této molekule na sebe navzájem kolmé). Pro snazší vyznačení můžete použít zakreslení molekuly do pomocného kvádrů, v němž atomy vodíku leží na na sebe kolmých podstavových úhlopříčkách.

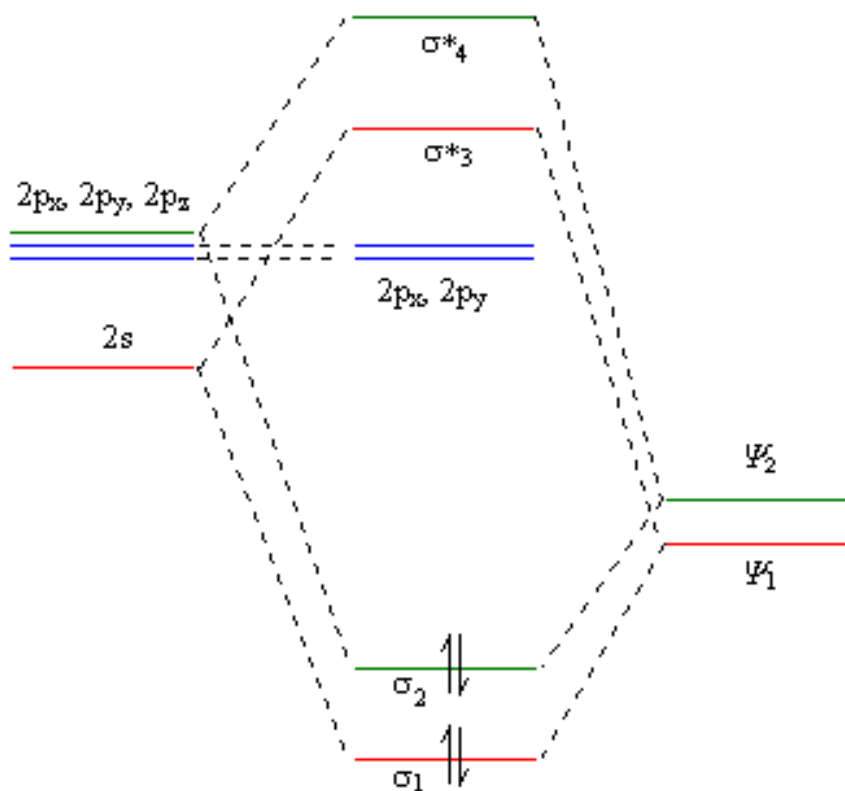
[3 body]



c) Jedna úloha na maticovou reprezentaci grupy symetrie C_{2v} [2 body]

5. Atomové a molekulové orbitály

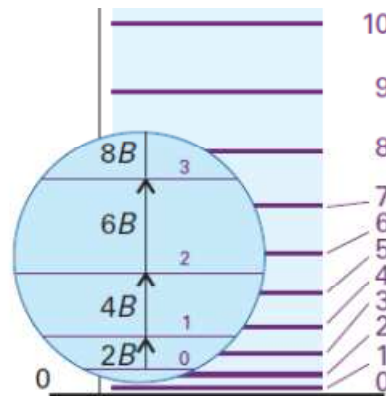
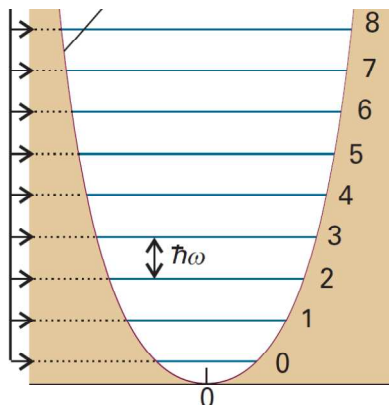
Na obrázku je znázorněn interakční diagram lineární molekuly typu AH_2 . Splňte následující úkoly a zodpovězte příslušné otázky.



- (a) O jakou molekulu se jedná? [1 bod]
- (b) Jakým kvantovým číslem n , l , m_l (popř. jejich kombinací) odpovídají AO $2s$, $2p_z$, $2p_x$, $2p_y$? ; [2 body]
- (c) Jaké fyzikální veličiny charakterizují následující čísla: n : l : m : [1 bod]
- (d) Ke všem jednotlivým hladinám připište, zda vzniká vazebný, nevazebný, nebo protivazebný MO. [1 bod]
- (e) K jednotlivým nakreslete všechny MO. [2 body]
- (f) Všechny MO doplňte nálepkami symetrie „g“ a „u“. [1 bod]
- (g) Jaká je spinová multiplicita molekuly C_2 v základním stavu Jaká by byla pro ion C_2^{2+} ? [2 body]

6. Populace molekulových hladin energie

Na následujících dvou obrázcích jsou znázorněna dvě typická rozložení hladin energie v molekulách.



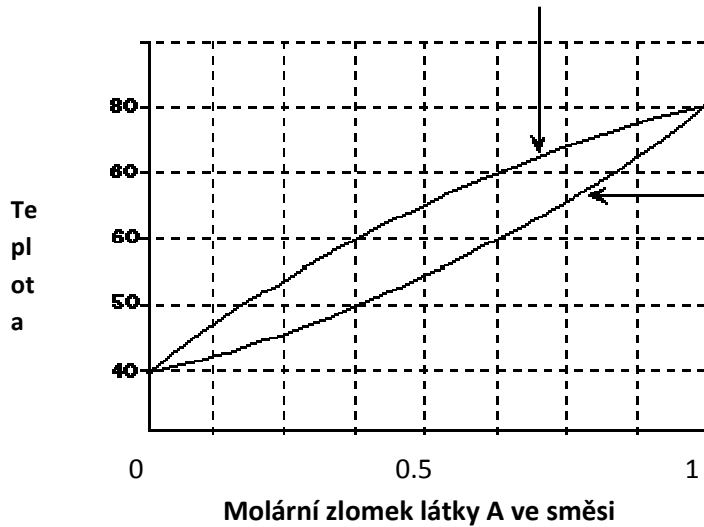
- (a) Vedle každého obrázku doplňte, jakým typům molekulových pohybů (v idealizovaném případě) odpovídá příslušné rozložení hladin energie. [1 bod]
- (b) Vedle každého obrázku doplňte vztah pro hladiny energie v závislosti na příslušném kvantovém čísle a možné hodnoty tohoto kvantového čísla. [3 body]
- (c) Pro který z molekulových pohybů jsou typické degenerace hladin? Napište stupeň degenerace v závislosti na kvantovém čísle vedle příslušného obrázku. [1 bod]
- (d) Jaké konfigurace můžeme vytvořit pro 5 částic s celkovou energií $9/2 \hbar\omega$ na soustavu hladin o energiích $1/2 \hbar\omega$, $3/2 \hbar\omega$, $5/2 \hbar\omega$,? Která z těchto konfigurací bude mít nejvyšší váhu? [3 body]

(b) Napište, čemu je podle Boltzmannova rozdělení úměrná populace stavu s energií ϵ_j a degenerací g_j při teplotě T . [1 bod]

(c) Nakreslete, jak vypadá podle Boltzmannova rozdělení obsazení soustavy hladin energie se konstantními vzdálenostmi při nízké a vysoké teplotě. [2 body]

7. Fázové diagramy směsí.

Následující obrázek znázorňuje fázový diagram směsi dvou kapalin A, B za tlaku $p=1$ atm



(a) K vyznačeným šipkám doplňte, které fáze jsou v dané oblasti stabilní a doplňte hodnoty bodů varu látek A a B.

$T_v(A) =$ $T_v(B) =$

[2 body]

(b) Jaký je bod varu kapalné směsi, která obsahuje 37.5% látky A? (Pomocná síť dělí 100 % na 8 dílů!).

[2 body]

(c) Jaké bude složení páry, která bude v rovnováze s kapalinou při zahřátí kapalné směsi obsahující 37.5% látky A k bodu varu?

[2 body]

(d) Roztok obsahující 62.5 % látky A bude zahřát k bodu varu. Určete tento bod varu a složení páry, která bude v rovnováze s roztokem tohoto složení.

[2 body]

(e) Při teplotě 290 K byla připravena směs hexanu (C_6H_{14}) a nitrobenzenu ($C_6H_5NO_2$) o složení znázorněném na obrázku vpravo černou tečkovanou čarou.

1 dílek mřížky odpovídá hodnotě 0.025.

Určete složení fáze bohatší na hexan:

$X_{Hexan} =$ $X_{Nitrobenzen} =$

a fáze bohatší na nitrobenzen:

$X_{Hexan} =$ $X_{Nitrobenzen} =$

[2 body]

