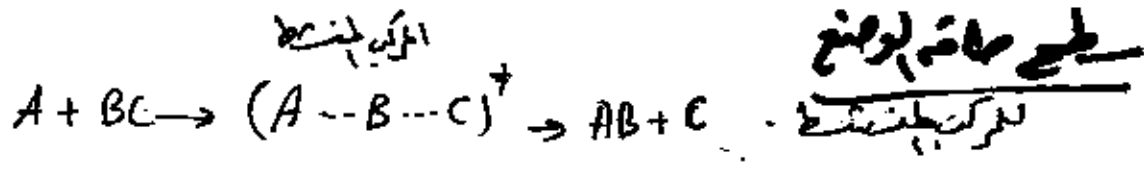


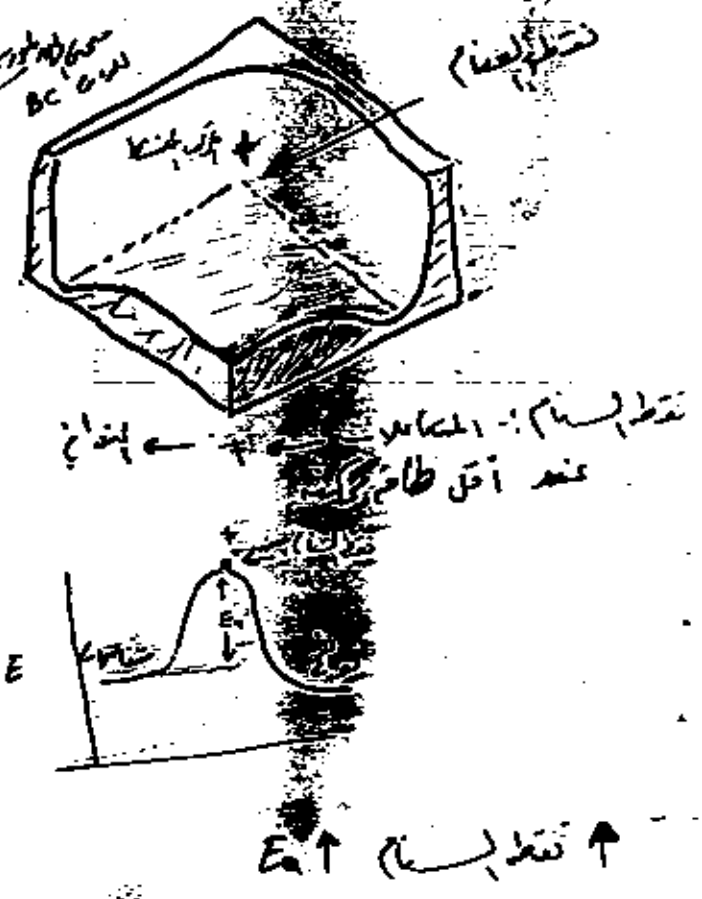
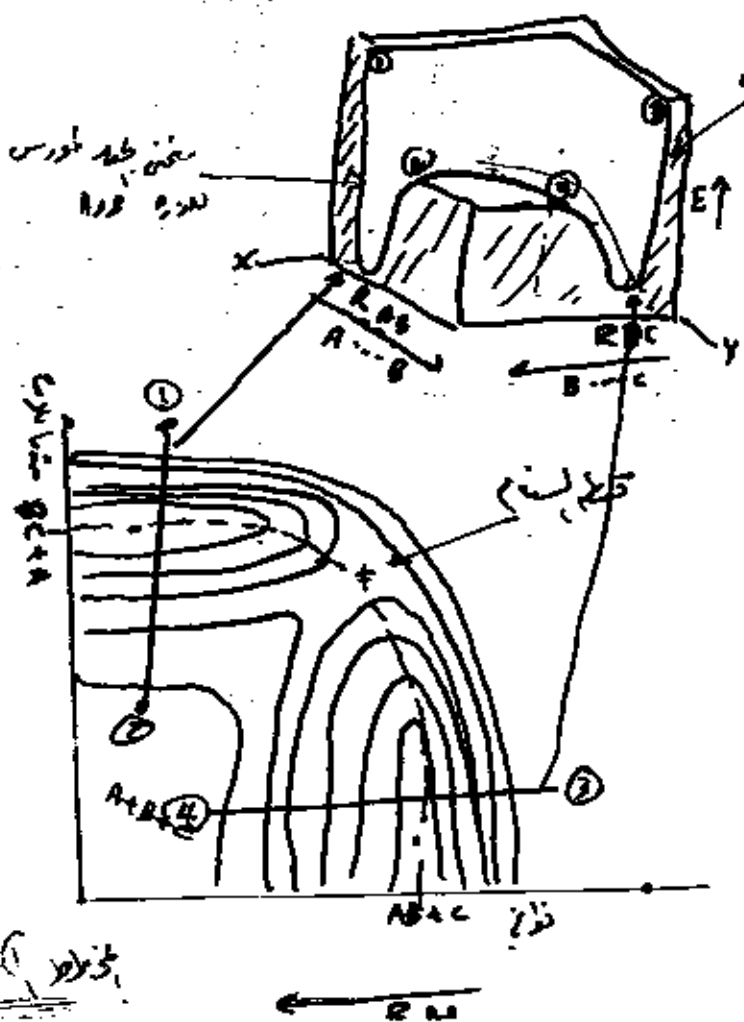
(69)

نظریہ مرکب پیچیدہ (پنڈریم لائنڈن) Activated complex Theory

علم کیم سے ذمہ حساب PE: نشاد بنیادی، مرکب پیچیدہ
 حساب PE: نتیجہ حساب و طبعی طاقت لوانج

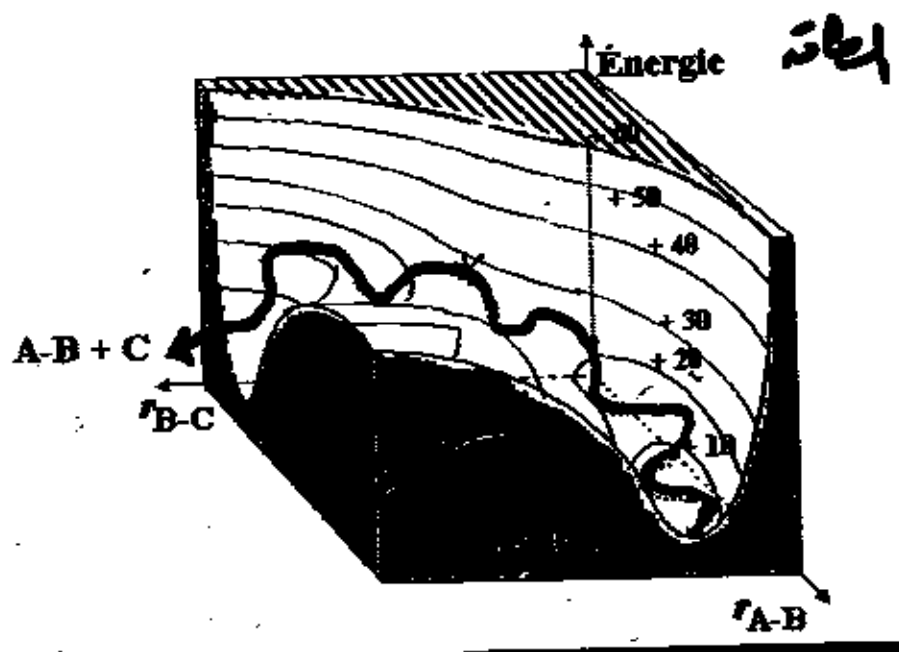


PE لمرکب پیچیدہ ($E(R_{AB}, R_{BC}, \theta)$)
 بیان لوانج، باع لوانج 4D لوانج تبدیل
 $180^\circ = \theta$
 لوانج تبدیل لوانج 3D لوانج تبدیل

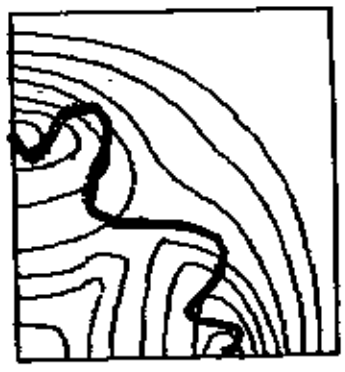
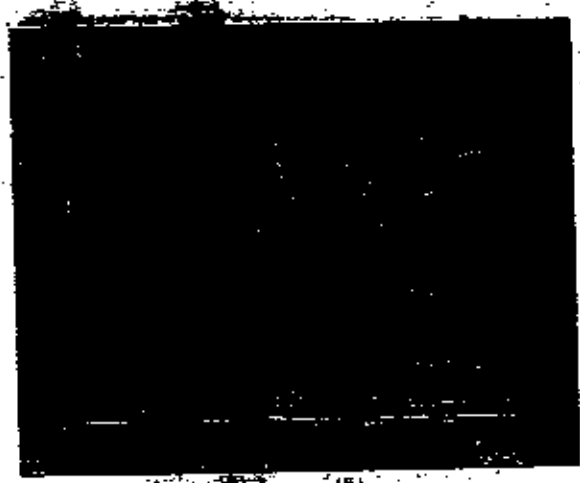
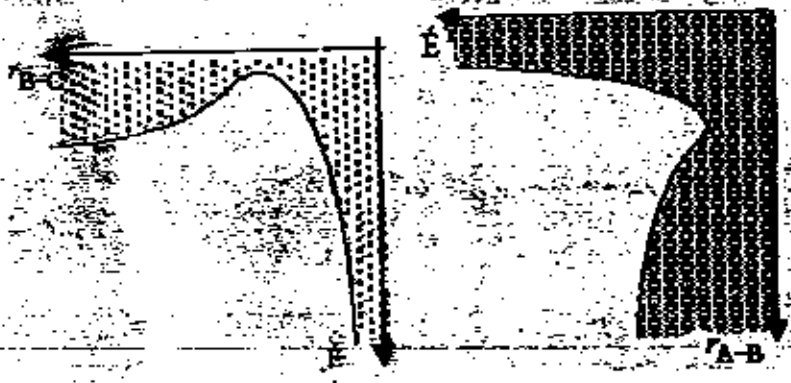


$E_a \uparrow$ نقطہ لوانج \uparrow

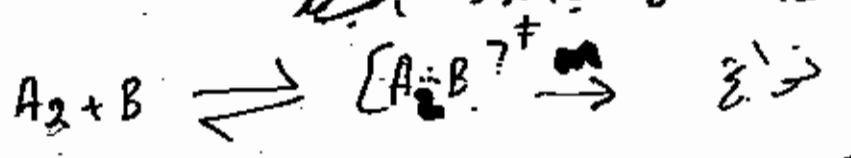
70



A --- B --- C



طريق حساب سرعة تفاعل كيميائي
 - تواتر التصادمات بين الجزيئات المتفاعلة
 - المركب المنتقل. الجزيء الذي يملك الطاقة اللازمة
 نظرًا للمركب المنتقل للتغلب على حاجز الطاقة



Rate تعبير $[A_2B]^{\ddagger}$

$$K^{\ddagger} = \frac{[A_2B]^{\ddagger}}{[A_2][B]} \rightarrow [A_2B]^{\ddagger} = K^{\ddagger} [A_2][B]$$

Rate تعبير $[A_2B]^{\ddagger}$

$$\text{Rate} = m [A_2B]^{\ddagger} \quad (1)$$

m = ثابت السرعة درجة T

$$\text{Rate} = k [A_2][B] \quad (2)$$

(2) = (1) لذا

$$m [A_2B]^{\ddagger} = k [A_2][B]$$

$$k = \frac{m [A_2B]^{\ddagger}}{[A_2][B]} \leftarrow K^{\ddagger}$$

$$k = m K^{\ddagger}$$

$(A \dots A \dots B)^{\ddagger}$
 مستحضره إنتقالية مع ذرات
 كاصفائات

إذا تفكك وانحلل تواتر تجميع الجزيئات اللزجة المتكافئة $\propto \Delta E$

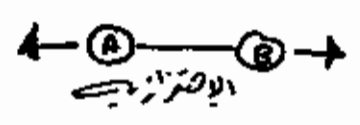
$$\Delta E = h \nu \quad (3)$$

ν = تردد الجزيء

ΔE ناتج من الطاقة لإصطناعية للذرات (درجة حرارية = 1)

$h \nu = kT$

$$\Delta E = kT = \frac{RT}{N_A} \quad (4)$$



- $h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
- $k = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$
- $R = 8.314 \text{ J.K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- $N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

$$\nu = \frac{kT}{h} = \frac{RT}{N_A \cdot h} \quad (4) = (3)$$

$\nu \propto T$

$\lambda = \frac{h}{m v} = \frac{h}{m \frac{kT}{m}} = \frac{h}{kT}$

k^\ddagger تعبر عن ΔG^\ddagger بسبب التوازن بين التردد والانتقال

$\Delta G^\ddagger = -RT \ln k^\ddagger \therefore \ln k^\ddagger = \frac{-\Delta G^\ddagger}{RT}$

$k^\ddagger = e^{-\frac{\Delta G^\ddagger}{RT}}$

$k = \frac{kT}{h} \cdot e^{-\frac{\Delta G^\ddagger}{RT}}$

ΔG^\ddagger = الطاقة الحرة للتركيب المنتجة (مقدار التنشيط الحراري)
 ΔS^\ddagger = إنتروبي إنتساج
 ΔH^\ddagger = إنتالبي إنتساج

$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$

$k = \frac{kT}{h} e^{\frac{\Delta S^\ddagger}{R}} e^{-\frac{\Delta H^\ddagger}{RT}}$

$k = \frac{kT}{h} e^{\frac{\Delta S^\ddagger}{R}} e^{-\frac{E_a}{RT}}$

$k = P z_{AB} e^{-\frac{E_a}{RT}}$

$A = P z_{AB} = \frac{kT}{h} e^{\frac{\Delta S^\ddagger}{R}}$

$P = \frac{kT}{h z_{AB}}$

حدة الإنتظام ΔS^\ddagger \rightarrow P يعرف A \leftarrow ΔS^\ddagger
 ΔS^\ddagger يعطي تصورا لشكل المركب المنتجة

$\Delta S^\ddagger = S^\ddagger - S_R$

$\Delta S^\ddagger \uparrow$ تعني زيادة الإنتظام
 $\Delta S^\ddagger \downarrow$ " " " "

S^\ddagger = إنتروبي المركب المنتجة
 S_R = إنتالبي

(72)

$$S_R < S^*$$

$$\Delta S^* = \text{حرکت}$$

القواييه ↑ ∴ أكثر عتوانيه سہ ملتا سہوت

روابط ≠ روابط ملتا سہوت
 $k_{rel} < k$ ∴ $e^{\frac{\Delta S^*}{R}} < 1$ ہے نظری لہذا

$P < 1$ - جاتہ ملتا سہوت لہذا = لہذا

$$S_R > S^*$$

القواييه ↓ ∴ انزل عتوانيه سہ ملتا سہوت

روابط ≠ روابط ملتا سہوت

$k_{rel} > k$ ∴ $e^{\frac{\Delta S^*}{R}} > 1$ ہے نظری لہذا
ملتا سہوت لہذا ∴ $P > 1$ ←

(ایالہ لغز اختاریم)

$$\Delta S = \Delta S^* \text{ ملتا سہوت}$$

ترتیب ≠ مت - مع ترتیب ملتا سہوت
زلا وضعی مخصوصہ ملتا سہوت کاوی سہوت لہذا
 $P = \text{صغیر لہذا}$