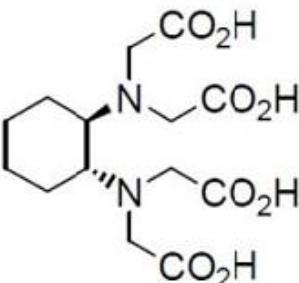


Используя внутрисферные энергии реорганизации из таблицы, а также собственные оценки энергии реорганизации растворителя, рассчитать:

- ожидаемые величины энергий активации в отсутствие электростатических эффектов ( $W = 0$ ) при равновесном потенциале;
- ожидаемые величины констант скорости при равновесном потенциале (предполагая трансмиссионный коэффициент равным 0.01).

Каждому выбрать одну реакцию.



cydta = 1,2-диаминоциклогексан замещенный edta

#### Квантовохимический расчет для электрохимических реакций:

| Redox system              | $\rightarrow_i/\text{kJ mol}^{-1}$ | $\leftarrow/\text{kJ mol}^{-1}$ | $\leftarrow / \rightarrow$ |
|---------------------------|------------------------------------|---------------------------------|----------------------------|
| $\text{Co(edta)}^{-/2-}$  | 157.5                              | 127.0                           | 0.81                       |
| $\text{Co(cydta)}^{-/2-}$ | 137.0                              | 128.6                           | 0.94                       |
| $\text{Cr(edta)}^{-/2-}$  | 130.7                              | 56.6                            | 0.43                       |
| $\text{Cr(cydta)}^{-/2-}$ | 102.7                              | 55.7                            | 0.54                       |