

Activation energy (Arrhenius activation energy)

An empirical parameter characterizing the exponential temperature dependence of the rate constant, k , $E_a = RT^2 \frac{d \ln k}{dT}$, where R is the gas constant and T the thermodynamic temperature. The term is also used for threshold energies in electronic potential surfaces, in which case the term requires careful definition.

Энергия активация (Аррениусовская энергия активации)

Эмпирический параметр, характеризующий экспоненциальную зависимость коэффициента скорости k от температуры,

$$E_a = RT^2 \frac{d \ln k}{dT}$$

где R - универсальная газовая постоянная, T – термодинамическая температура.

Термин «энергия активации» используется также для обозначения пороговых энергий на поверхностях потенциальной энергии. В этом случае термин требует более четкого определения.

Комментарий.

«Пороговые энергии на поверхностях потенциальной энергии» - это разности энергий между активированным комплексом и реагентами, т.е. энергия активации ТАК.

Arrhenius equation

An equation that represents the dependence of the rate constant k of a reaction on the absolute temperature T :

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

In its original form the pre-exponential factor A and the activation energy E_a are considered to be temperature-independent.

Уравнение Аррениуса.

Уравнение, описывающее зависимость коэффициента скорости реакции от абсолютной температуры:

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

В первоначальной (простейшей) форме уравнения предэкспоненциальный множитель A и энергия активации E_a считаются независимыми от температуры.

Modified Arrhenius equation

This is an extension of the simple Arrhenius equation in which the pre-exponential factor is proportional to T^n where T is the temperature and n a constant:

$$k = BT^n Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

B is a temperature-independent constant.

Модифицированное уравнение Аррениуса (перевод).

Более сложный вариант уравнения Аррениуса, в котором предэкспоненциальный множитель пропорционален T^n , где T – абсолютная температура, а n и B – константы, не зависящая от температуры:

$$k = BT^n Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$