



che
chemie

Paula Bruice

Organische Chemie

Prüfungstraining

Prentice Hall

PEARSON
Studium

HINTERGRUND Die Berechnung kinetischer Parameter

Um die Werte von E_a , ΔH^\ddagger und ΔS^\ddagger einer chemischen Reaktion zu berechnen, müssen die Geschwindigkeitskonstanten der Reaktion bei verschiedenen Temperaturen ermittelt werden:

E_a kann aus der Arrhenius-Gleichung durch graphische Interpolation einer Auftragung von k gegen $1/T$ erhalten werden, da

$$\ln k_2 - \ln k_1 = -E_a / R (1/T_2 - 1/T_1)$$

Bei einer gegebenen Temperatur kann ΔH^\ddagger aus E_a erhalten werden, weil gilt:

$$\Delta H^\ddagger = E_a - RT$$

Verwenden Sie diese Informationen, um die Übung 54 durchzuführen.

ΔG^\ddagger kann (in kJ/mol) mit Hilfe der folgenden Gleichung, die ΔG^\ddagger zur Geschwindigkeitskonstanten bei einer bestimmten Temperatur in Beziehung setzt, bestimmt werden:

$$-\Delta G^\ddagger = RT \ln (kh/TK_B)$$

In dieser Gleichung ist h die Planck'sche Konstante $6,62608 \times 10^{-34}$ Js und k_B die Boltzmann-Konstante $1,38066 \times 10^{-23}$ J · K⁻¹.

Die Aktivierungsentropie kann aus den beiden anderen kinetischen Parametern über die Formel $\Delta S^\ddagger = (\Delta H^\ddagger - \Delta G^\ddagger) / T$ bestimmt werden.

(b) Wie groß ist die Gleichgewichtskonstante derselben Reaktion bei einer Temperatur von 125 °C (398 K)?

52 (a) Um wie viel muss sich das ΔG° einer bei 25 °C durchgeführten Reaktion ändern, um die Gleichgewichtskonstante um einen Faktor 10 zu erhöhen?

(b) Um wie viel muss sich ΔH° ändern, falls $\Delta S^\circ = 0$ J K⁻¹ mol⁻¹ beträgt?

(c) Um wie viel muss sich ΔS° ändern, falls $\Delta H^\circ = 0$ J mol⁻¹ beträgt?

53 Die Twistboot-Konformation des Cyclohexans besitzt eine um 15,9 kJ/mol (3,8 kcal/mol) höhere freie Enthalpie als die Sesselkonformation. Berechnen Sie den prozentualen Anteil der Twistboot-Konformere in einer Cyclohexanprobe bei 25 °C. Stimmt der errechnete Wert mit dem in Abschnitt 2.12 angegebenen Zahlenwert für die relativen Molekülzahlen dieser beiden Konformationen überein?

54 Die Geschwindigkeitskonstanten einer Reaktion wurden bei fünf unterschiedlichen Temperaturen gemessen. Berechnen Sie anhand der nachfolgenden Daten die experimentelle Aktivierungsenergie und danach ΔS° , ΔH° und ΔG° für die Reaktion bei einer Temperatur von 30 °C.

Temperatur	Gemessene Geschwindigkeitskonstante (s ⁻¹)
31,0	$2,11 \times 10^{-5}$
40,0	$4,44 \times 10^{-5}$
51,5	$1,16 \times 10^{-4}$
59,8	$2,10 \times 10^{-4}$
69,2	$4,34 \times 10^{-4}$

Copyright

Daten, Texte, Design und Grafiken dieses eBooks, sowie die eventuell angebotenen eBook-Zusatzdaten sind urheberrechtlich geschützt. Dieses eBook stellen wir lediglich als **persönliche Einzelplatz-Lizenz** zur Verfügung!

Jede andere Verwendung dieses eBooks oder zugehöriger Materialien und Informationen, einschließlich

- der Reproduktion,
- der Weitergabe,
- des Weitervertriebs,
- der Platzierung im Internet, in Intranets, in Extranets,
- der Veränderung,
- des Weiterverkaufs und
- der Veröffentlichung

bedarf der **schriftlichen Genehmigung** des Verlags. Insbesondere ist die Entfernung oder Änderung des vom Verlag vergebenen Passwortschutzes ausdrücklich untersagt!

Bei Fragen zu diesem Thema wenden Sie sich bitte an: info@pearson.de

Zusatzdaten

Möglicherweise liegt dem gedruckten Buch eine CD-ROM mit Zusatzdaten bei. Die Zurverfügungstellung dieser Daten auf unseren Websites ist eine freiwillige Leistung des Verlags. **Der Rechtsweg ist ausgeschlossen.**

Hinweis

Dieses und viele weitere eBooks können Sie rund um die Uhr und legal auf unserer Website herunterladen:

<http://ebooks.pearson.de>