

Bsp. 4: Interpretation der Arrhenius-Gleichung mit Hilfe der statistischen Thermodynamik

- a) Welche Bedeutung hat der Arrhenius-Term $e^{-E_A/RT}$ für eine Gasphasenreaktion (d.h. kontinuierliche Energieverteilung der kin. Energien der Teilchen i.d. Gasphase)
- b) Wie groß sind die thermischen Energien $k_B T$ bzw. RT bei Raumtemperatur und bei 1000 K?
- c) Was sind typische Werte von Arrhenius-Termen? Berechnen Sie dies für 30 kJ/mol, 100 kJ/mol und 200 kJ/mol sowie 25 °C, 35 °C, 1000 °C, 1500 °C.

Wesentlich ist hierbei nicht, dass die Werte korrekt in die Formel eingesetzt werden (das ist – hoffentlich – trivial), sondern dass man die Absolutzahlen bei den Ergebnissen und deren Abhängigkeit von den Parametern bewusst wahrnimmt und „verinnerlicht“ (Unterschied zw. abstrakter Formel und konkreter Zahl...).

Bsp. 5: Kinetische Gastheorie + Transportkinetik

- a) Wie groß sind für N_2 Moleküle die mittlere freie Weglänge, die mittlere Geschwindigkeit, die mittlere Flugzeit und der Diffusionskoeffizient (in reinem N_2 -Gas)? Berechnen Sie die Werte jeweils für 1 bar bei 25°C und 1000°C und für 10^{-3} mbar bei 25°C. Ein N_2 Molekül kann als Kugel mit einem Durchmesser von 0.37 nm angenommen werden.
- b) Berechnen Sie dieselben Größen für H_2 bei 25°C und 1 bar (H_2 -Molekül als Kugel mit Durchmesser 0.29 nm)

$$k_B = 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \quad R = 8,314 \cdot 10^{-3} \text{ kJ/mol}$$

Bsp. 6: Diffusionsprofile

Effekt von Temperatur und Zeit bei thermisch aktivierter Diffusion, z. B. im Festkörper:

- a) Berechnen Sie den Diffusionskoeffizienten D und die Diffusionslänge $L_D = 2\sqrt{D \cdot t}$ für Sauerstoffdiffusion in BaTiO_3 (wichtig bei der Herstellung von Kondensatoren: Einstellen der exakten Sauerstoffstöchiometrie).

Parameter: 300°C für 1 Stunde, 1 Tag und 1 Woche, sowie 1000°C für 1 Stunde.

$$D = D_0 \cdot e^{-\frac{\epsilon_A}{k_B T}} \quad \text{mit } D_0 = 0,3 \text{ cm}^2/\text{s}; \epsilon_A = 0,9 \text{ eV}$$

- b) Berechnen Sie das Diffusionsprofil einer auf 1 normierten Konzentration c_{norm} für die in a) gegebenen Parameter gemäß $c_{\text{norm}} = 1 - \text{erf}\left(x/2\sqrt{D \cdot t}\right)$.
- c) Die Diffusionslänge bei der Diffusion von Zn in Cu vergrößert sich von 19 nm auf 10,4 μm , wenn T von 400°C auf 800°C erhöht wird (relevant bei Legierungsbildung, hier Messing). Berechnen Sie die Aktivierungsenergie der Diffusion.
- d) Berechnen Sie, um welchen Faktor sich in Bsp. c) der Diffusionskoeffizient von Zn in Cu erhöht, wenn die Temperatur von 400°C auf 800°C steigt
 $D_0 = 2,1 \cdot 10^{-1} \text{ cm}^2/\text{s}; \epsilon_A = 1,96 \text{ eV}$.

$$k_B = 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \quad R = 8,314 \cdot 10^{-3} \text{ kJ/mol}$$