

UE Physikalische Chemie für VT (164.340)

Rechenübungen Chemische Kinetik

Bsp. 1: Kinetik einer Reaktion erster Ordnung

Für eine Reaktion erster Ordnung ($A \longrightarrow \text{Prod.}$) wurden bei zwei Temperaturen die Geschwindigkeitskonstanten bestimmt:

$$T_1 = 40 \text{ °C: } k_{40} = 3,0 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

$$T_2 = 60 \text{ °C: } k_{60} = 5,1 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$$

- Berechnen Sie die Aktivierungsenergie und den präexponentiellen Faktor dieser Reaktion.
- Ermitteln Sie die Halbwertszeit dieser Reaktion bei 50 °C.

Bsp. 2: Interpretation der Arrhenius-Gleichung mit Hilfe der statistischen Thermodynamik

- 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)
- Wie groß sind die thermischen Energien $k_B T$ bzw. RT bei Raumtemperatur und bei 1000 K?
- 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. 3: Bestimmung der Geschwindigkeitskonstante einer alkalischen Esterhydrolyse

Hydrolyse von Methylacetat:

- ist eine Reaktion zweiter Ordnung
- verläuft nach folgender Reaktion: Ester + NaOH \longrightarrow Säure + Alkohol
- Die Anfangskonzentrationen von Ester und NaOH sind gleich.
- Der Reaktionsfortschritt wurde mittels Konduktometrie (Leitfähigkeitsmessung) bestimmt \rightarrow Daten siehe Excel-Sheet.

Aufgabe:

Bestimmen Sie die Geschwindigkeitskonstante dieser Reaktion aus den gegebenen Daten (siehe Excel-Tabelle „*Kinetik Esterhydrolyse - Werte f Bsp.2*“)

Bsp. 4: Bestimmung der Aktivierungsenergie einer alkalischen Esterhydrolyse

Hydrolyse von Ethylacetat:

- ist eine Reaktion zweiter Ordnung
- verläuft nach folgender Reaktion: Ester + NaOH \longrightarrow Säure + Alkohol
- Die Anfangskonzentrationen von Ester und NaOH sind gleich.
- Der Reaktionsfortschritt wurde bei vier verschiedenen Temperaturen mittels Konduktometrie bestimmt
- Ein Phänomen das in der Praxis auftritt ist, dass die Anfangsleitfähigkeit nicht einfach zugänglich ist. Daher ist sie in diesem Bsp. durch geeignete Extrapolation zu ermitteln.

Aufgabe:

Bestimmen Sie die Aktivierungsenergie dieser Reaktion aus den gegebenen Daten (siehe Excel-Tabelle „*Kinetik Esterhydrolyse - Werte f Bsp.3*“)