

"Molekulare Kinetik"

SS 2023

**12. Übungsblatt** (zur Vorlesung 12, am 07.07.2023)

1. Ein Gefäß enthält ein ideales Gas, das sich aus Teilchen vom Typ A zusammensetzt. Der Druck beträgt  $p = 1 \text{ kPa}$  und die Temperatur  $T = 500 \text{ K}$ .
  - a) Wie viele Zusammenstöße erfolgen pro Kubikzentimeter und Sekunde, wenn der Teilchendurchmesser  $0.1 \text{ nm}$  beträgt? Legen Sie das "harte Kugel" Potential und eine Molmasse von  $36 \text{ g/mol}$  zugrunde. Berücksichtigen Sie, dass die Formel für die AA Zusammenstöße etwas anderes ist als für die AB Stöße.
  - b) Wie groß ist die Geschwindigkeit der Reaktion  $A + A \rightarrow A_2$ , wenn die Schwellenenergie der Reaktion  $6 \cdot 10^{-21} \text{ J}$  beträgt?
  - c) Wie groß ist die entsprechende Aktivierungsenergie nach Arrhenius (siehe Blatt 11, Aufgabe 2)?

(5 Pkte.)

2. Wie groß muss die Aktivierungsentropie einer bimolekularen Reaktion sein, um denselben Einfluss auf den präexponentiellen Faktor einer Geschwindigkeitskonstante zweiter Ordnung auszuüben wie ein sterischer Faktor von  $10^{-5}$ ?

(2 Pkte.)

3. Bei  $T = 300 \text{ K}$  nehmen die Zustandssummen typischerweise folgende Werte an:

für jeden Translationsfreiheitsgrad:  $5 \cdot 10^9 \text{ dm}^{-1}$

für jeden Rotationsfreiheitsgrad: 50

für den Schwingungsfreiheitsgrad: 5

Die Schwellenenergie (aktivierter Komplex) betrage einheitlich  $10 \text{ kJ/mol}$ . Berechnen Sie mit Hilfe der statistischen Thermodynamik die Geschwindigkeitskonstante für die folgenden Reaktionen:

i)  $\text{Atom} + \text{Atom} \rightarrow \text{aktivierter Komplex} \rightarrow \text{Produkt}$

ii)  $\text{Atom} + \text{lineares Molekül} \rightarrow \text{nicht-linearer aktivierter Komplex} \rightarrow \text{Produkt}$

(5 Pkte.)