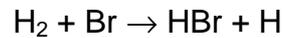


Übungsaufgaben zur Wahlpflichtvorlesung Reaktionskinetik SS 2013

Blatt 5

Aufgabe 14

Aus einer sehr vereinfachten Berechnung der Potentialfläche für die Reaktion



folgt ein linearer Übergangszustand mit folgenden Eigenschaften:

Schwingungsfrequenzen (in cm^{-1}):	2472
	217 (zweifach entartet)
	178i (Reaktionskoordinate)
Bindungsabstände (in 10^{-10} m):	1,62 (H-H)
	1,42 (H-Br)
Trägheitsmoment (in g cm^2):	$1,83 \times 10^{-39}$
Schwellenenergie:	$18,1 \text{ kcal mol}^{-1}$

Entartung des el. Grundzustands: $g_{\text{el}} = 2$

Eigenschaften der Reaktanten:

H_2

Schwingungsfrequenz (in cm^{-1}):	4395
Bindungsabstand (in 10^{-10} m):	0,742
Trägheitsmoment (in g cm^2):	$4,57 \times 10^{-41}$
Entartung des el. Grundzustands:	$g_{\text{el}} = 1$

Br

Entartung des el. Grundzustands: $g_{\text{el}} = 4$

- Überlegen Sie sich, wie man die Trägheitsmomente des Übergangszustandes und des Wasserstoffmoleküls berechnet. Wie erhält man die Entartung des elektronischen Grundzustands der beteiligten Spezies?
- Berechnen Sie die Geschwindigkeitskonstante der Reaktion für 500 und 600 K.

c) Bestimmen sie aus den in Teil b) berechneten Geschwindigkeitskonstanten die Aktivierungsenergie und den Vorfaktor unter Verwendung der Arrheniusgleichung.

(Hinweis: $k(500\text{ K}) = 4,1 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, $k(600\text{ K}) = 1,0 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$)

Vergleichen Sie die so erhaltene Aktivierungsenergie und den Vorfaktor mit der Schwellenenergie bzw. mit dem Vorfaktor, den sie in Teil b) berechnet haben.