

6. Übungsblatt zur Vorlesung Physikalische Chemie II

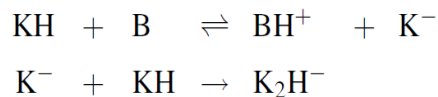
- Kinetik und Struktur -

Wintersemester 2014/15

Prof. Dr. K.-H. Gericke, Mathias Piescheck

Aufgabe 1

Für die basenkatalysierte Aldol-Kondensation zweier Ketonmoleküle (KH) lässt sich folgender auf die entscheidenden Schritte vereinfachter Mechanismus annehmen.

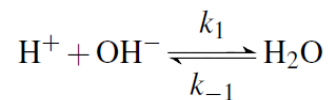


B steht dabei für die Base, K^- für das intermediäre Carbanion und K_2H^- ist das deprotonierte Endprodukt.

Bestimmen Sie die Produktbildungsgeschwindigkeit in dem Sie annehmen, dass sich die Konzentration des intermediären Carbanions nicht ändert.

Aufgabe 2

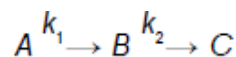
Bei einem Temperatursprung auf 20 °C beträgt die Relaxationszeit der Autoprotolysereaktion des Wassers 39 μs .



Berechnen Sie die Geschwindigkeitskonstante für Hin- und Rückreaktion mit Hilfe des Ionenproduktes $K_w = 10^{-14}$. Hinweis: Die Relaxation erfolgt exponentiell: $x = x_0 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$

Aufgabe 3

Für die Reaktion



haben Sie die Anfangsdaten $[\text{A}]_0 = 20 \text{ mol/L}$, $[\text{B}]_0 = [\text{C}]_0 = 0$. k_1 und k_2 sind gleich $1 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. Benutzen Sie ein Computerprogramm (z.B. Excel) und die numerischen Näherungsverfahren und zeichnen Sie die Abhängigkeiten der Konzentrationen $[\text{A}]$, $[\text{B}]$ und $[\text{C}]$ von der Zeit. Überlegen Sie sich ein sinnvolles Δt und eine Endzeit.

i	t_i	$[\Delta\text{A}]_i$	$[\text{A}]_i$	$[\Delta\text{B}]_i$	$[\text{B}]_i$	$[\Delta\text{C}]_i$	$[\text{C}]_i$
0	$0 \cdot \Delta t$	$-k_1[\text{A}]_0 \Delta t$	$[\text{A}]_0$	$-\Delta[\text{A}]_0 - \Delta[\text{C}]_0$	$[\text{B}]_0$	$k_2[\text{B}]_0 \Delta t$	$[\text{C}]_0$
1	$1 \cdot \Delta t$	$-k_1[\text{A}]_1 \Delta t$	$[\text{A}]_0 + [\Delta\text{A}]_0$	$-\Delta[\text{A}]_1 - \Delta[\text{C}]_1$	$[\text{B}]_0 + [\Delta\text{B}]_0$	$k_2[\text{B}]_1 \Delta t$	$[\text{C}]_0 + [\Delta\text{C}]_0$
2	$2 \cdot \Delta t$	$-k_1[\text{A}]_2 \Delta t$	$[\text{A}]_1 + [\Delta\text{A}]_1$	$-\Delta[\text{A}]_2 - \Delta[\text{C}]_2$	$[\text{B}]_1 + [\Delta\text{B}]_1$	$k_2[\text{B}]_2 \Delta t$	$[\text{C}]_1 + [\Delta\text{C}]_1$
N	$n \cdot \Delta t$	$-k_1[\text{A}]_n \Delta t$	$[\text{A}]_{n-1} + [\Delta\text{A}]_{n-1}$	$-\Delta[\text{A}]_n - \Delta[\text{C}]_n$	$[\text{B}]_{n-1} + [\Delta\text{B}]_{n-1}$	$k_2[\text{B}]_n \Delta t$	$[\text{C}]_{n-1} + [\Delta\text{C}]_{n-1}$