

### 13. Übungsblatt zur Vorlesung Physikalische Chemie II

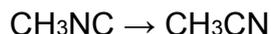
#### - Kinetik und Struktur -

Wintersemester 2014/15

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

#### Aufgabe 1

Bei der Umlagerung von Methylisonitril zu Acetonitril



handelt es sich um eine Reaktion erster Ordnung, deren Geschwindigkeitskonstante bei 200°C  $k = 0,03 \text{ min}^{-1}$  ist. Es sollen in einem ein Kubikmeter großen Reaktor 45 Mol Methylisonitril umgesetzt werden.

a) Leiten Sie die zeitliche Abhängigkeit der Eduktkonzentration  $[\text{CH}_3\text{NC}]$  durch Lösen folgender Differentialgleichung her:

$$-\frac{d[\text{CH}_3\text{NC}]}{dt} = k \cdot [\text{CH}_3\text{NC}]$$

b) Wie groß ist die Acetonitril-Konzentration nach drei Stunden?

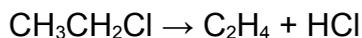
c) Wie lange würde es dauern, bis nur noch fünf Mol Methylisonitril übrig sind?

d) Wann sind I) 50 %, II) 75 %, III) 87,5 %, IV) 93,75 % und V) 98,4375 % des Eduktes verbraucht?

e) Was besagt die auf einen Reaktanden bezogene Reaktionsordnung?

#### Aufgabe 2

Bei einer Temperaturerhöhung von 260 °C auf 300 °C verzehnfacht sich die Geschwindigkeit der Zersetzung von Chlorethan.



a) Wie groß ist die Aktivierungsenergie der Reaktion, wenn Sie den Frequenzfaktor als temperaturunabhängig annehmen?

b) Berechnen Sie den Frequenzfaktor mit Hilfe der für 600 K bestimmten Geschwindigkeitskonstanten  $k = 3,7 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$ .

### Aufgabe 3

Das IR-Spektrum von Stickstoffmonoxid weist bei  $1877\text{ cm}^{-1}$  eine Schwingungsbande auf, die der Stickstoff-Sauerstoff-Bindung zugeordnet werden kann.

- Bestimmen Sie die Wellenlänge und die Frequenz für die Schwingungsbande.
- Berechnen Sie die Kraftkonstante für die Stickstoff-Sauerstoff-Bindung, in dem Sie annehmen, dass es sich um reines  $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$  handelt.
- Was lässt sich über die Bindungsordnung im Stickstoffmonoxid sagen, wenn Sie Ihren Wert mit den Kraftkonstanten von  $\text{O}_2$  ( $k(^{16}\text{O}_2) = 1177\text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ ) und  $\text{N}_2$  ( $k(^{14}\text{N}_2) = 2294\text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ ) vergleichen?
- Welche reduzierte Masse müsste das Molekül bei gleicher Kraftkonstante haben, damit der Schwingungsübergang im sichtbaren Bereich des Lichtes ( $400\text{ nm} < \lambda < 800\text{ nm}$ ) liegt?
- Welcher Einzelatommasse eines zweiatomigen, homonuklearen Moleküls entspräche dies? Vergleichen Sie den Wert mit den hier vorliegenden Atommassen.

### Aufgabe 4

Betrachten Sie das Molekül Bortrifluorid.

- Bestimmen Sie die Punktgruppe mit Hilfe des Flussdiagramms und geben Sie dazu die Lage der für die Punktgruppenbestimmung relevanten Symmetrieelemente an.
- Wie viele Translations-, Rotations- und Schwingungsfreiheitsgrade besitzt Bortrifluorid?
- Bestimmen Sie die Zahl und die Symmetrie der Normalschwingungen.
- Geben Sie an, welche Schwingungen IR- und welche Raman-aktiv sind.
- Erklären Sie die Begriffe „Valenzschwingung“ und „Deformationsschwingung“. Zeigen Sie jeweils **eine** Valenz- und Deformationsschwingung am Beispiel des Bortrifluorids.