

### 13. Übungsblatt zur Vorlesung Physikalische Chemie II

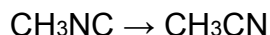
#### - Kinetik und Struktur -

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.

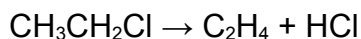
a) Leiten Sie die zeitliche Abhängigkeit der Eduktkonzentration  $[\text{CH}_3\text{NC}]$  durch Lösen folgender Differentialgleichung her:

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

- 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.