

## 6. Übungsblatt zur Vorlesung Physikalische Chemie II

– Kinetik und Struktur –

Prof. Dr. Karl-Heinz Gericke, Mikhail Poretskiy M.Sc.

Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der TU Braunschweig

### Aufgabe 1

Für die Reaktion  $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$  haben Sie die Anfangsdaten  $[A]_0=10 \text{ mol/L}$ ,  $[B]_0=[C]_0=0$ .  $k_1$  und  $k_2$  sind gleich  $1 \text{ L}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ .

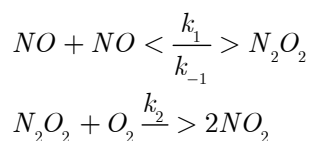
Benutzen Sie ein Computerprogramm (z.B. Excel) und die numerischen Näherungsverfahren und zeichnen Sie die Abhängigkeiten der Konzentrationen  $[A]$ ,  $[B]$  und  $[C]$  von der Zeit.

Hinweis:

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

### Aufgabe 2

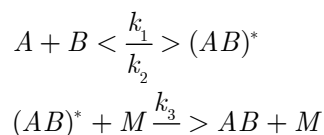
Für die Reaktion  $2 \text{ NO} + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{ NO}_2$  wurde folgender tatsächlich ablaufender Mechanismus ermittelt:



Stellen Sie das Geschwindigkeitsgesetz zur Bildung von  $\text{NO}_2$  als Ausdruck von  $[\text{NO}]$  und  $[\text{O}_2]$  auf unter der Annahme, dass die Konzentration des Intermediates konstant sei, d.h.  $\frac{d[\text{N}_2\text{O}_2]}{dt} \approx 0$ .

### Aufgabe 3

Für die Reaktion  $A + B + M \rightarrow AB + M$  ( $A$  – das Atom,  $B$  – das Molekül,  $M$  – der Stoßpartner) wurde folgender tatsächlich ablaufender Mechanismus ermittelt:



Zum Zeitpunkt  $t=0$  ist die Konzentration  $[A]$  gleich 0, und Sie drehen den Generator der Atome  $A$  mit der konstanten Generationsgeschwindigkeit ( $w_A$ ,  $\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ ) an. Die Konzentrationen des Stoßpartners  $M$  und des Moleküls  $B$  sind konstant. Benutzen Sie die Quasistationaritätsbedingung sowohl für das Atom  $A$  als auch für  $(AB)^*$  und berechnen Sie die stationäre Konzentration des Intermediates  $(AB)^*$ .

### Aufgabe 4

Bei einer enzymatischen Reaktion nach dem Michaelis-Menten-Mechanismus beträgt die Michaelis-Konstante  $K_M = 53 \text{ mol}\cdot\text{m}^{-3}$ . Bei einer Substratkonzentration von  $0,78 \text{ mmol}\cdot\text{cm}^{-3}$  wurde die Reaktionsgeschwindigkeit zu  $0,28 \text{ mol}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$  bestimmt. Wie groß ist bei gleicher Enzymkonzentration die maximale Reaktionsgeschwindigkeit?