US 12 - Chemische Reaktionslehre

Grundsätzlich lassen sich chemische Reaktionen physikalisch über

zwei Disziplinen beschreiben, der Thermodynamik (Beschreibung des Gleichgewichtszustands auhand der Stabilität um Reaktanden and Produkten) and der Reaktionskinetik (Beschreibung von Reaktions

geschwirdigkeiten und den Weg in den Gleichgewichtszustand anhand der Stabilität des Übergangszustands).

Thermodynamik Enorgieändening Antongs- und Endzustand Kinetik: Weg zwischen Antongs- und Endzustand Beide Konzepte müssen nicht immer konform sein. So konn eine Rkn.

db.

grundsätelich therwodynamisch sehr gänstig sein, jedoch Kinetisch so gehemmt, class sie nicht stattfindet. Thermodynamik Eine chemische Reaktion ist grundsätzlich spontan, wenn ihre Gibbs-energie positiv ist, ob sie tabsächlich stalltändet hängt von ihrer Kinetik

Δron G = Δron H - T. Δron S

Realthouse Realthouse Mossfule Temporatur

T] = K = °C - 273.15 Arm He = Z 7: AgHi - Z Mi AgHi

Grundsätzlich nehmen wir an , dost organische Rauktionen reversibel sind (aleichgewichtsreaktionen) Analog zu ACACI ist die Gleichgewichtskonstante K, als Quotient der Produktaktivitäten durch die Reaktandenaktivitäten im alciongewicht definiert, die gerter Mäherung der dimensions-

losen Konzentrationen entsprechen. $K = \frac{\alpha(c)^{eq}}{\alpha(0)^{eq}} = \frac{\alpha(0)^{eq}}{[A]_{eq}[B]_{eq}}$ $A + B \rightarrow c + D$

 $K = \frac{[c][B]^3}{[A]^2}$ 2A -> 3B + C K ist dimensions los (! K hat keine Einheit!)

Die	•	Gle	eich	vge	w/c	etd	kon	nst	αv	te	l	ÚSS	ł	Sic	h	a	uch	\	au	5	de	r	Re	akt	idV	2-
		eve																								
	1	7 ^{k×n}	60	= -	Q-	Γ /	20 C	k)			a	≙ G	V		ant	_		Т:	âΔ	hon	0.ha	. 1	- -	000.0	ıtur	
		-1×11			1,	, ,	<i>A</i> (, ,			1)		OD I	D1:6	OUVII					w 30~	WIE.	. ,	ewy	DANG	M	
Rec	ık	tion	ısk	inc	tik																					
Se	hr	- ,	wic	Wti	d :	E	ga		Wie	2	the	/ ///	od	/Vncl	мis	ch	b	eVa	4 EU	gf	e	ine	R	ecik	tion	n
ist	,	Wiy	k	ÖNI	Men	1	<eiv< td=""><td>æ</td><td>A</td><td>NSSO</td><td>ge</td><td>E</td><td>LΥ</td><td>Re</td><td>oıkt</td><td>noi</td><td>ges</td><td>Ma</td><td>Wiv</td><td>dig</td><td>kei't</td><td>- (</td><td>Kiv</td><td>etil</td><td>k)</td><td></td></eiv<>	æ	A	NSSO	ge	E	LΥ	Re	oıkt	noi	ges	Ma	Wiv	dig	kei't	- (Kiv	etil	k)	
		hon																								
		nde																								
W.C	. (aud	1	Kon	Mes	hal	ושטר	en .	mi	+ 6	inh	eite	n	(4	<u>ه</u> -	der	cm	3)	w	d	nic	.ht _	eì _	den	t-lie	<u>ل</u>
div	we	nsù	×××	(ose	9 ,	AKt	ivite	y te	n.	Wos	ا د	etz	ł J	olgy	131	<u>"</u>	we.	રોળદ	.,	zigle	me		Euso	4WM	nen	
das	SU	vog	VO		PC	<u>II</u> :	CI	new 	1150	ne I	Ke L	oj Kr L	IONS	Kin	91;K	7	, all	<u>e</u>	INY	<u>. i</u> v	M	Oly:	\	א	201	MC -
		lich																								
		ik																							wig	
		OMNS							100		2014		04		ن س	,	<i>></i>	μ.	101			U	C 100	0.5		
All	g	em [.]	ein	ro r	- (Reo	ıkt	smoi	VOV	lav	d	e	'nE	r	cl	nev	n.	R	601	kti	: מכ					
	_																									
G	ι –																									
				/	Te	X	_,	Akti Cki	vier net	k) Rc	he	regiè	?													
				E,	4	1	\vdash	•																		
					+				- (vei<	= f	eak ody	ter	gev milz	ithel 1	pic										
			4	_{om} Gi	6		1			, yıc	,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,	30 Y	y KA C	717 -	,											
					1			/	ノ																	
							1	redo	ticu	7 CQ	ovd	rel-	e.													

PCII PVK Tag 1
Warm up: $\int_{c_0}^{a} \frac{1}{x^2} dx = \ln(c) - \ln(c_0)$ $\int_{c_0}^{c} \frac{1}{x^2} dx = -\frac{1}{c} + \frac{1}{c_0}$
Definitionen
· Greschwindligkeit!
Umsatzgeschwindigkeit: $V_i = \frac{1}{v_i} \frac{dn_i}{dt}$
On sategeschwindigkeit: $V_i = \frac{1}{v_i} \frac{dn_i}{dt}$ Stöchiometrischen koeff. Reaktionsgeschwindigkeit: $V_i = \frac{1}{v_i} \frac{dc_i}{dt}$ Kon zentration
-> wie kommt man vom einen aufs andere? $v_i^{rxv} = v_i^{ums} \cdot \frac{1}{v} = \frac{1}{v_i^{uns}} \cdot 1$
Stöchiometrische Koeffizienten finden:
$A + B \rightarrow C + D \Rightarrow A + B = C + D$ $\Rightarrow CACBCCD \Rightarrow \forall i \text{ (stoch. Koell.)}$
Alles auf eine Seite und Edukte negativ (Konvention)
Bsp.: Schreibe die Geschwindigkeit der unteren
Reaktion auf: A+B -> C+D Für Prüfung: alle Stoffe aufsehr.
1.) Koeffizienten bestimmen:
-A-B+C+D=0
2.) Geschw. aufschweiben
$V = -\frac{dcA}{dt} = -\frac{dcB}{dt} = +\frac{dc}{dt} = +\frac{dco}{dt}$
Glese tee:
-> dlyemein: Diese Form von Gesetzen gilt nur für
Elementarreaktionen, aber das ist das
was wir in dieser Vollesung ausschliesslich
laghera
REPARTED IN Weston Koeff> immer positiv
V = K · TT C; Nur Konz. der Edukte außschreiben, weil v nicht von Produkten abhängt.

Geschwirdigkeitsgesetz: Kombination von Geschwindigkeit und Gesetz V = - dcA = K. d-11 cB1 = KCACB -> bei Rechnungen v nicht mehr so wichtig, sondern die Dal des - Kcack Bis hier: Für genom eine Reaktion: Edukte - Produkte Kombinieren von Reaktionen $A + B \leftarrow C + D (R_1, R_1)$ Das sivol zwei Elementarreaktionen A+B -> c+D (R1) C+D -> A+B (R-1) Sohreibe das Geschwindigkeitsgesetz für den Stoff A hin: 1.) Schreibe de... mit pos. Vorzeichen dcA = ... 2.) Bestimme die Vorzeichen für Gesetze anhand von "nimmst Stoff ab oder zu in Rxn" - Überlegung dea = Okacaco + K-1ccco Abnahme/ Zunahme Bsp.: Selbe Aufapabe, aber mit: A+B => C+D 2A -> D Vorgehen wie vorher - Faktor 2 1.) dcA = ... 2.) dcA = - K1 CACB - 2K2CA2 Woher Faktor 2 ? (R1): - dCA = K1CACB (Rz): - 2 dca = kzca2 - 2 - dca = Zkzca2

Bsp.: Atomrekombinationen Drittes H ist Stosspourtner, das ist ein Statf der nicht H + H + H -> Hz + H (chemisch) an der Reaktion dcH = - FSKCH + KCH teil nimmt. => H + H + H = Hz + H => -ZH + Hz =0 V=- 1 dcH = + dtHz (Geschwindigkeit) V = K · Cu (gresetz = k. TICEd.) -> kombinievt: - 1 dcH = kch => dcH = Zkch Anders: H+H+M -> Hz+M - 1 dch = KCICM = KCI Reaktionsordnung (nur definiert für Gesetze der Form v=k. Tri") Reaktionsordnung ist die Summe alle Exponenten mi Ve = K TT civil Ordnung bzgl. Stoff i also Ordnung der Rxn. = [m; vorher: m; = 17:1 weil Elementarreaktionen 67 m; muss above night 17:1 oder überhaupt gan zzahlig sein -> experimentell bestimmt. La je nach Aufg. m; benechnen oder direkt "wissen" von oben v = k1 CACB + k2 CA v = CA(K1CB+ k2) ordinal von B nicht definiert veil keine frodukt form ordinal von A=1 & definiert Bsp.: 43 also Reaktionsordnung auch nicht definiert Molekulavität Anzahl an Teilchen, die beim "essentieuen/wesentlichen" Schwitt der Reaktion dabei sind.

· Unimolekular (Monomolekular)	
· Bimolekular	
· Trimolekular (! Atomvekombination)	
Sp: H + H20 + CO2 -> H2CO3 + H	
Bimolekular, weil wersentliche Rkt. ist	
Hzo & coz zu HzCoz (H= stosspartner)	
Ordnung d. Reaktion: Z-3	
L> ordnung begl. HzO, CO2: 1	
Godnung bzgl. H: 0-1	
Aber wie mache ich jetzt Geschwindigkeitsgesetz wenn	
Vc = - d CHZO = K CHZO CCOZ · CH = K CHZO CCOZ ; K1 =	0-1
	= K·CHM
tür di de keine Stossportner, weil den = 0	
Dimension and Einheit von &	
$m_{1,1} = \sum_{i=1}^{n} w_{i,1}$	m;
dim (k) = (Konzentration) Med-1. Zeit	
$[K] = \frac{1}{(mo!)^{mtot-1} \cdot S}$	
Mögliche Bedingungen beim Aufschreiben von Gese	teen
• Überschuss: $[A]$, $>>$ $[B]$, $=>$ $[A]$ (ϵ) $=$ $[A]$.	
· Gleiche Andangskonzentration: [A] = [B] = [C] =	
-> A + B -> hier ist [A] = [B] wail [A].	=[B].
$V = -\frac{dc_A}{dt} = kc_A c_B = kc_A^2$	
Lösen von Geschwindigkeitsgesetzen Tabelle für forsung madi	Eusammen-
Was ist $c_A(t)$	
1.) Greschwindig Keitsgesetz aufschweiben (& Ehren	ve go

· Vorgelagertes Gleichgewicht: Rsp.: A = B B = C

Vorgelagentes GGW. (Vor - & Rückrechtion sind offeich sohnell) D.h. rechnerisch: Kaca = kg·cB => ka = cB := K = drawnit weitenchen. Beispiele: Sommer 2015 SOZ + OH +M Ka HO SOZ + M (1a) HOSOZ + M K-a> SOZ + OH + M $HOSO_{z} + O_{z}$ $K_{b} \rightarrow SO_{3} + O_{z}H$ (1b) $SO_{3} + (H_{z}O)_{z}$ $K_{c} \rightarrow SO_{3} + H_{z}O + H_{z}O$ (1d) $SO_{3} + H_{z}O + H_{z}O$ $K_{d} \rightarrow H_{z}SO_{4} + H_{z}O$ (1d)1.) Sohreibe Greschwindigkeit v auf für 1a-1d jeweils separat Z.) Bestimme Ordnung und Molekulanität der Reaktionen 3.) Gib dim () and Einheit von k an 4.) Stelle Gresetz für HzSBq auf und finde Ausdruck, der nur von soz, OH, M & Oz abhängt, indem HOSOz, SO3, SO3 H2O als quasistationar angenommen werden 1.) $v_s = -\frac{d[SO_2]}{dt} = -\frac{d[OH]}{dt} = \frac{d[HOSO_2]}{dt}$ (d[soz] =-ka[soz][OH][M]" + k_a[HOSoz][M]") (d[HOSOz] = ka[SOz][OH][M]M - k-a[HOSOz][M]M - KB[HOSOz][Oz] NP = - 9[HOSO5] = - 9[05] = 9[05H] Vc = - dEsoz] = - dE(HzO)z] = dEsoz HzO] - dEHzO]
dt dt dt dt (d[SO3] = - kc[SO3][H2O)2] + kp[HOSO2][O2]) Vd = - d[503. Hz0] = = d[Hz504]

1.) . SOZ + OH + M xas HOSOZ + M V = - desoz = - den - denosoz + deso · HOSO + M SO + OH + M V = - dCHOSOZ = dCSOZ = dCOH · HO SO2 + O2 - Kb SO 2 + O2H V = - denosoz = - desoz = desoz = desoz = desoz · soz + (H20), - soz. H20 + H20 V = - dcsoz = dccHzO)z = dcsoz.HzO = dcHzo · 502. H20 + H20 Kd > H2504 + H20 V = - d csos. Hzo = - dchzsog 2.) · SO2 + OH + M Ka > HOSO2 + M x Bimolekular, weil Energie zwischenspeichberbar in HOSOz-Bindung, bevor Stosspartner kommt. , weil wesentlicher Schrift bimolek ist und M far Energieabfuhr da ist. x Ordnungen: 802, OH: 1 M: 0-1 total: 2-3 · HOSO = + M -> SO2 + OH + M × Unimolekular, weil wesentlich ist Zerfell won HOSOz, night Anreguy (Mononukleaur, wenn night man Annegury nötig) 6> z.B. radioaktiver Zerfall × Ordnungen: HOSOz: 1 } total: 1-Z M: 0-1 BRUNRest: Molekularität: Bimolekular Ordnung: für alle Edukte=1 und total = 2 (7)

$$\Delta(t) = \Delta_0 e^{-(k_a + k_b)}$$

$$\rightarrow \tau_R = \frac{1}{k_a + k_b}$$