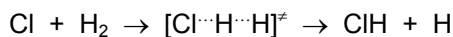


**Übungsblatt 10** (zu bearbeiten bis 28.06.2013)**Aufgabe 31: Theorie des Übergangszustands und Potentialflächen**

Schätzen Sie mit Hilfe der Eyring-Gleichung die Geschwindigkeitskonstante der Reaktion



ab, die einen Kettenfortpflanzungsschritt in der Chlorknallgas-Reaktion darstellt! Machen Sie dazu mit Hilfe der unten abgebildeten Potentialfläche sinnvolle Annahmen über die Aktivierungsenergie (genauer Wert: 8.14 kcal/mol) und über die Struktur des (linearen) Übergangszustands. Vernachlässigen Sie die Beiträge der Molekülschwingungen zu den Zustandssummen!

*Hinweis zur Abbildung:* Das Konturdiagramm zeigt die potentielle Energie in kcal/mol als Funktion der Abstände  $R_{\text{HH}}$  und  $R_{\text{ClH}}$  in Einheiten des Bohrschen Radius,  $a_0 = 52.9$  pm, für eine lineare Geometrie  $\text{Cl}\cdots\text{H}\cdots\text{H}$ . (Literatur: W. Bian, H.-J. Werner, J. Chem. Phys. 112 (2000) 220.)

