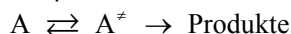


**Übungsblatt 10** (zu bearbeiten bis 20.01.2020)**Aufgabe 36: Theorie des Übergangszustands für unimolekulare Reaktion**

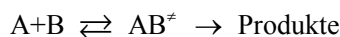
Schätzen Sie einen Zahlenwert für den präexponentiellen Faktor (Frequenzfaktor) der unimolekularen Gasphasenreaktion:



Nehmen Sie dabei an, dass der Druck ausreichend hoch ist, so dass eine Boltzmannsche Energieverteilung vorliegt. Der aktivierte Komplex soll sich dabei strukturell kaum vom Edukt A unterscheiden. Die Temperatur beträgt 300 K.

**Aufgabe 37: Vergleich von Theorie des Übergangszustands und Stoßtheorie für bimolekulare Reaktion starrer Kugeln**

Berechnen Sie einen Ausdruck für den präexponentiellen Faktor der bimolekularen Reaktion:



mithilfe der Theorie des Übergangszustands unter der vereinfachenden Annahme, dass die Edukte A und B starre Kugeln sind. Vergleichen Sie das Resultat mit dem Ergebnis, welches die einfache Stoßtheorie liefert.

**Aufgabe 38: Zustandsspezifische Reaktionsquerschnitte und Geschwindigkeitskonstanten**

Eine Reaktion soll auf Seiten der Edukte zwei Zustände  $i_1$  und  $i_2$  haben. Zustand  $i_1$  ist der Grundzustand ( $E(i_1) = 0$ ), während Zustand  $i_2$  eine um  $100 \text{ cm}^{-1}$  höhere Energie besitzt. Auf der Produktseite gibt es vier Zustände  $f_1$  bis  $f_4$ . Die Reaktionsquerschnitte  $\sigma(\varepsilon_r, i, f)$  als Funktion der Energie sind gegeben durch

$$\sigma(\varepsilon_r, i, f) = T(i, f) \cdot \pi d^2 \cdot \left[ 1 - \frac{\varepsilon^*(i, f)}{\varepsilon_r} \right] \quad \text{für } \varepsilon_r \geq \varepsilon^*$$

bzw.  $\sigma(\varepsilon_r, i, f) = 0$  für  $\varepsilon_r < \varepsilon^*$

wobei  $\varepsilon_r$  die Stoßenergie ist und  $T(i, f)$  sowie  $\varepsilon^*(i, f)$  in der Tabelle angegeben sind. Die reduzierte Masse für die Kollision sei  $5 \text{ g/mol}$ ,  $d$  betrage  $0.1 \text{ nm}$ . Berechnen Sie aus diesen Angaben die Geschwindigkeitskonstante  $k(T)$  bei einer Temperatur von  $300 \text{ K}$ !

$i, f$	$T(i, f)$	$\varepsilon^*(i, f) \text{ in cm}^{-1}$
$i_1, f_1$	0.05	1000
$i_1, f_2$	0.20	1000
$i_1, f_3$	0.10	1000
$i_1, f_4$	0.05	1000
$i_2, f_1$	0.1	500
$i_2, f_2$	0.3	500
$i_2, f_3$	0.1	500
$i_2, f_4$	0.1	500