

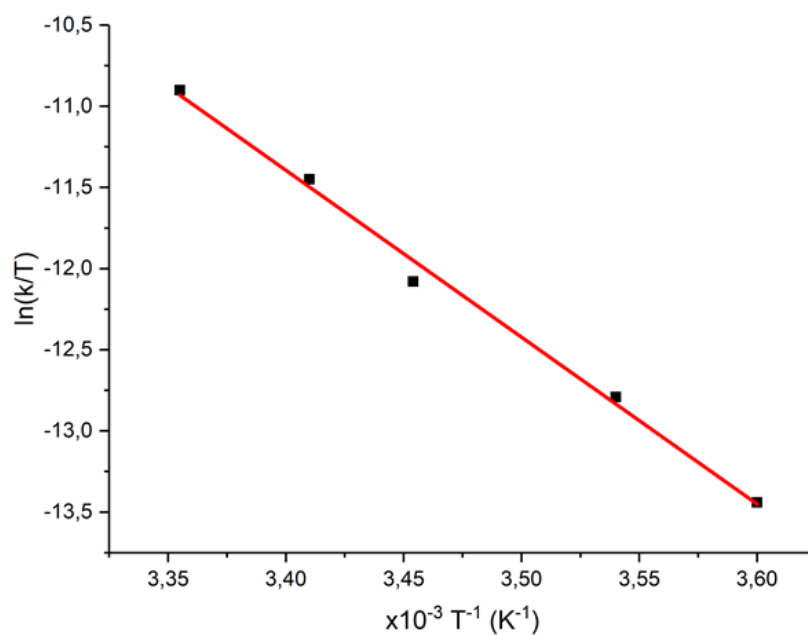
Besprechung am 05.07.2019

## Übungsblatt 9

### 1) Eyring-Theorie

Eine Kupplungsreaktion wurde mittels UV-vis Spektroskopie untersucht und der Eyring-Plot des Reaktionskomplexes aufgenommen. Die allgemeine Gleichung für die graphische Auftragung lautet:

$$\ln\left(\frac{k}{T}\right) = \ln\left(\frac{k_B\kappa}{h}\right) + \frac{1}{R} \cdot \left(\Delta S^\ddagger - \frac{\Delta H^\ddagger}{T}\right)$$



Die Geschwindigkeitskonstante  $k$  lässt sich in der statistischen Thermodynamik mittels der Eyring-Gleichung ausdrücken.

$$k = \kappa \cdot \frac{k_B T}{h} \cdot \bar{K}^\ddagger$$

- Leiten Sie aus der Eyring-Gleichung die Gleichung für die graphische Auftragung her.
- Berechnen Sie die Aktivierungsenthalpie  $\Delta H^\ddagger$  und Aktivierungsentropie  $\Delta S^\ddagger$  der Reaktion ( $y$ -Achsenabschnitt = 23,56).
- Bestimmen Sie die Gleichgewichtskonstante  $\bar{K}^\ddagger$  für eine Temperatur von 25°C.

*Besprechung am 05.07.2019*

## 2) Einfache Statistik

Ein System bestehe aus

- i. 5 Molekülen,
- ii. 100 Molekülen,

die vier verschiedene Energien  $\varepsilon_0 = 0$ ,  $\varepsilon_1 = \varepsilon$ ,  $\varepsilon_2 = 2\varepsilon$  und  $\varepsilon_3 = 3\varepsilon$  einnehmen können. Durch welche Konfigurationen (Makrozustände) kann der Systemzustand mit der Gesamtenergie von  $E_{Gesamt} = 4\varepsilon$  realisiert werden? Geben Sie das statistische Gewicht für jeden Makrozustand an.

## 3) Statistische Thermodynamik

- a) Wie wird die Zustandssumme eines Systems beschrieben? Von welcher Größe ist sie abhängig?
- b) Wir betrachten ein hypothetisches 2-Niveau-System. Der Grundzustand ist einfach entartet mit einer Energie von null, der oberste Zustand ist zweifach entartet und hat eine Energie von  $\varepsilon$ . Wie lautet die Zustandssumme? Welchem Wert nähert sie sich bei unendlich hoher Temperatur?