

# 1 Erster Hauptsatz

## 1.1 Born-Haber-Kreisprozess von BaBr<sub>2</sub>

Wir betrachten den Born-Haber Kreisprozess anhand von BaBr<sub>2</sub>. Dazu sind folgende Daten gegeben:  $\Delta_b H^\ominus = -758 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta_{\text{sub}} H^\ominus = 182 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta_{\text{ion}} H^\ominus = 1469 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta U_{\text{Diss}}^\ominus = 192.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta_{\text{verdampf}} H^\ominus = 29.6 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta E_{\text{Gitter}}^\ominus = 1984 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

Die Dissoziationsenthalpie  $\Delta_{\text{Diss}} H^\ominus$  von Br<sub>2(g)</sub>, welches nach



zerfällt, berechnet sich mit

$$\Delta_{\text{Diss}} H^\ominus = \Delta U_{\text{Diss}}^\ominus + \Delta n RT \quad (1)$$

und ergibt  $\Delta_{\text{Diss}} H^\ominus = 195.3 \text{ kJ mol}^{-1}$ , wobei  $\Delta n = 1$ ,  $T = 298 \text{ K}$  verwendet wurde. Betrachten wir die Dissoziationsenthalpie  $\Delta_{\text{Diss2}} H^\ominus$  von Br<sub>2(fl)</sub>, welches nach



zerfällt, muss die Verdampfungsenthalpie  $\Delta_{\text{verdampf}} H^\ominus$  berücksichtigt werden. Es gilt

$$\Delta_{\text{Diss2}} H^\ominus = \Delta_{\text{Diss}} H^\ominus + \Delta_{\text{verdampf}} H^\ominus \quad (2)$$

und damit  $\Delta_{\text{Diss2}} H^\ominus = 224.9 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Im Born-Haber Kreisprozess sind bis auf die Elektronenaffinität  $\Delta E_{\text{A}}^\ominus$  alle Größen nun bekannt, weswegen  $\Delta E_{\text{A}}^\ominus$  berechnet werden kann.

$$\begin{aligned} -\Delta_b H^\ominus + \Delta_{\text{Diss}} H^\ominus + \Delta_{\text{sub}} H^\ominus + \Delta_{\text{ion}} H^\ominus - 2\Delta E_{\text{A}}^\ominus - \Delta E_{\text{Gitter}}^\ominus &= 0 \\ \Rightarrow \Delta E_{\text{A}}^\ominus &= -\frac{1}{2}\Delta_b H^\ominus + \Delta_{\text{Diss}} H^\ominus + \Delta_{\text{sub}} H^\ominus + \Delta_{\text{ion}} H^\ominus - \Delta E_{\text{Gitter}}^\ominus \end{aligned} \quad (3)$$

Damit ergibt sich  $\Delta E_{\text{A}}^\ominus = -310.2 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Der Bildungsprozess aus den Elementen ist exotherm.