



# ACOC I Übungsstunde: Thermodynamik und Kinetik

**Dominik Götz**  
11.12.2023



# Outline

1. Prüfungsaufgabe

2. Nachbesprechung

Aufgabe 5

Aufgabe 6

3. Theorie

Thermodynamik

Reaktionskinetik

4. Serie 12

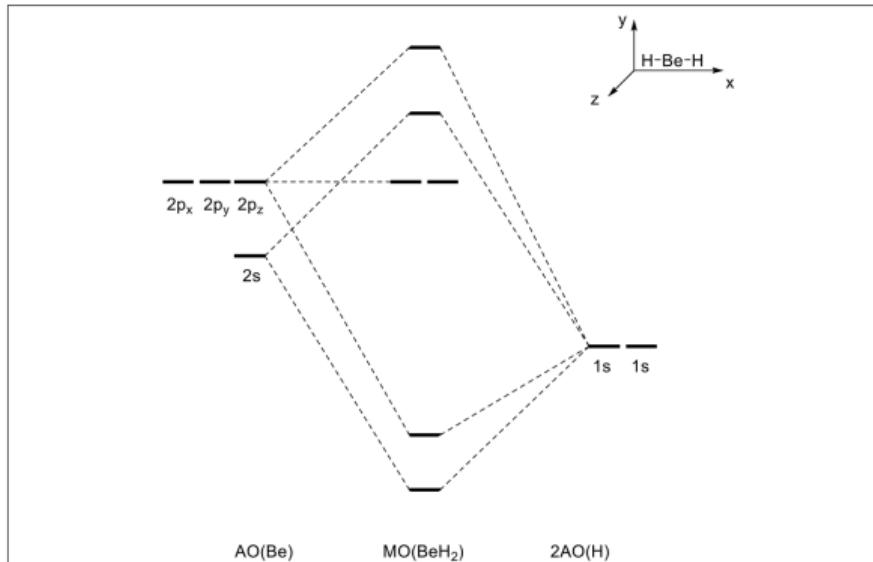
5. Feedback

6. Mental Health

# Aufgabe: Molekülorbitale

Be:	H:
-----	----

- b) Zeichnen Sie die Atomorbitale (AO) für Be und H in das Diagramm (unten) ein. (6 Punkte)
- c) Zeichnen Sie die MO (Molekülorbitale) für das BeH<sub>2</sub>-Molekül im Diagramm ein und benennen Sie diese. (6 Punkte)
- d) Füllen Sie die Elektronen zunächst in die jeweiligen Atomorbitale ein und anschliessend auch in die Molekülorbitale. (3 Punkte)

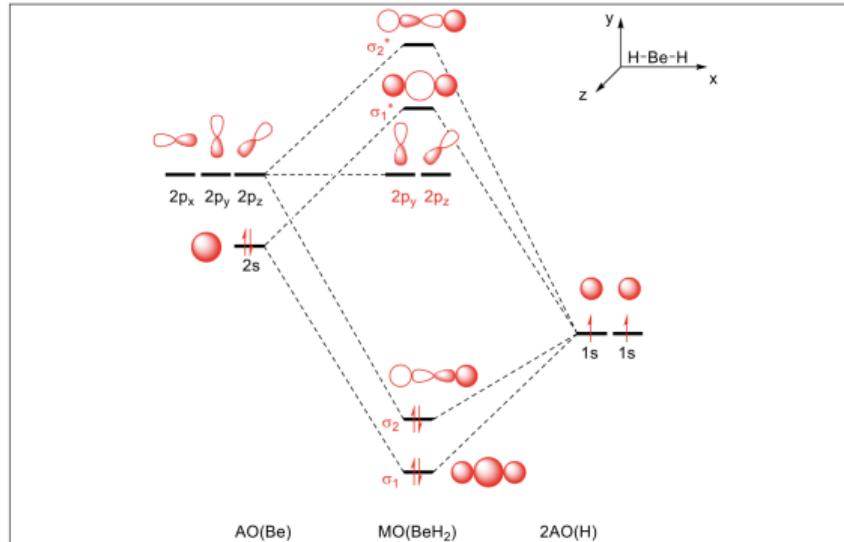


# Lösung: Molekülorbitale

Be:  $1s^2 2s^2$

H:  $1s^1$

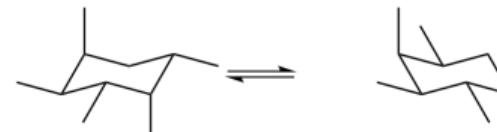
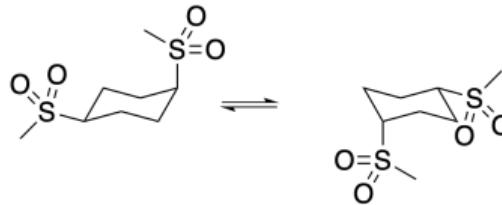
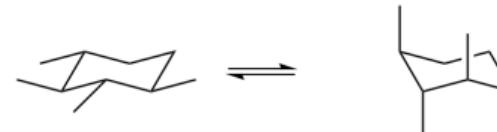
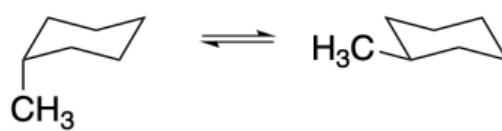
- b) Zeichnen Sie die Atomorbitale (AO) für Be und H in das Diagramm (unten) ein. (6 Punkte)
- c) Zeichnen Sie die MO (Molekülorbitale) für das  $\text{BeH}_2$ -Molekül im Diagramm ein und benennen Sie diese. (6 Punkte)
- d) Füllen Sie die Elektronen zunächst in die jeweiligen Atomorbitale ein und anschliessend auch in die Molekülorbitale. (3 Punkte)



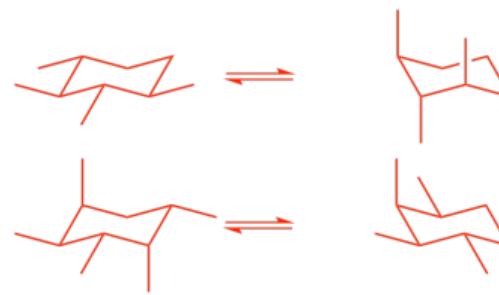
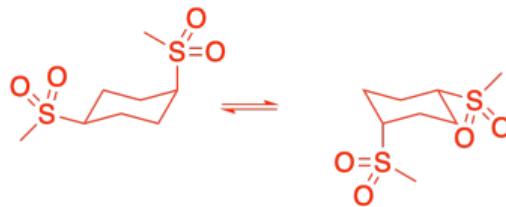
# Serie 11: Aufgabe 5

Wie flippt man Ringe richtig?

- Was nach oben schaut, bleibt auch so!
- Aber es ist danach nicht in der gleichen Stellung. Es wechselt axial und äquatorial.
- Welche der Folgenden sind falsch?

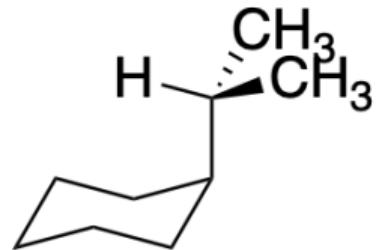
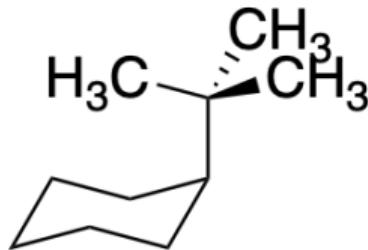


## Serie 11: Lösung 5



## Serie 11: Aufgabe 6

Man kann iPr so drehen, dass die Methylgruppen vom Ring weg zeigen. Das geht bei tBu nicht. Daher steigt der A-Value so viel stärker an als beim Vergleich zwischen Ethyl in iso-Propyl.



# Aufgabe Arrhenius Gleichung

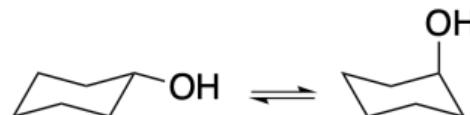
Finde  $K$  für  $A \rightarrow B$  ( $A = \text{äq.}$ ,  $B = \text{ax}$ ) und berechne, in welchem Anteil sie bei Raumtemperatur vorliegen.

Substituent	$A / \text{kcal mol}^{-1}$
Me	1.7
Et	1.8
OH	0.9
$t\text{Bu}$	5.5
Ph	3.1
$i\text{Pr}$	2.1

*A-Parameter Tabelle für substituierte Cyclohexane*

**Wichtig:** Rechnungen, die ohne Taschenrechner nicht zu lösen sind, können anhand der unten abgedruckten Tabelle abgeschätzt werden.  
Einheiten sind immer anzugeben!

$RT \approx 0.6 \text{ [kcal/mol]}$ (at $T = 298.15 \text{ K}$ )	$e^{-\frac{3}{2}} \approx 0.2$	$e^{-\frac{2}{3}} \approx 0.5$	$e^{-0.54} \approx 0.6$	$e^{-0.3} \approx 0.7$
	$e^{\frac{3}{2}} \approx 5$	$e^{\frac{2}{3}} \approx 2$	$e^{0.54} \approx 1.7$	$e^{0.3} \approx 1.3$



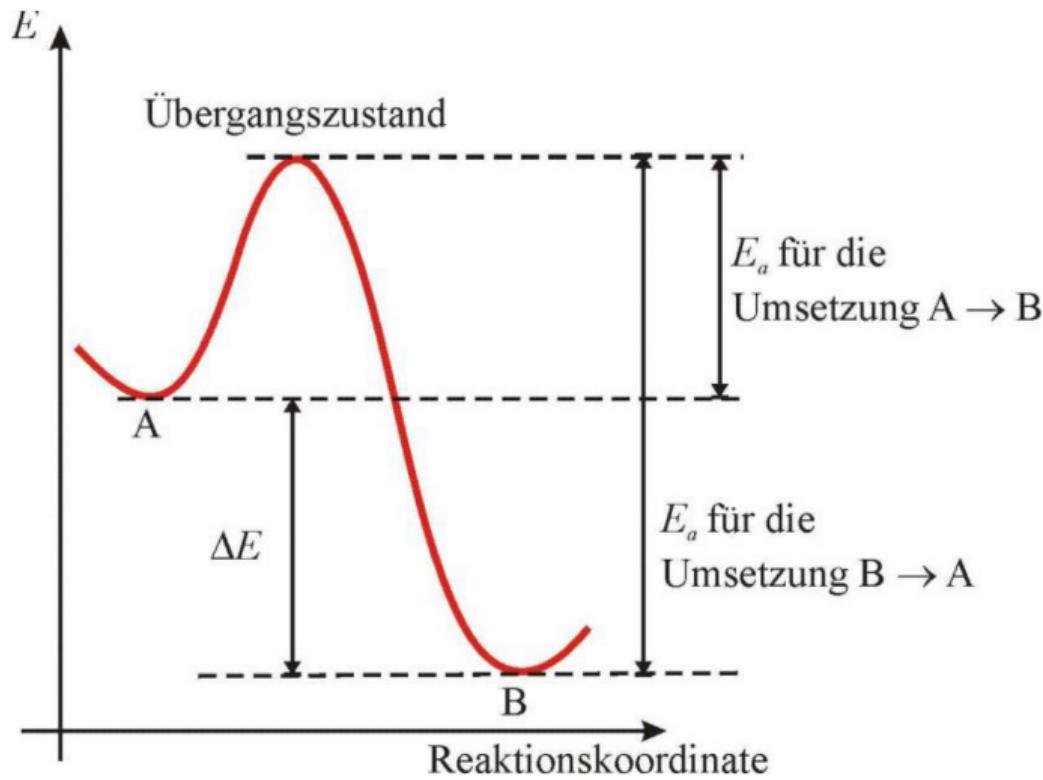
# Lösung Arrhenius Gleichung

- $\Delta G_{AB} = -0.9 \text{ kcal/mol}$
- $K = \frac{[A]}{[B]} = \frac{X(\text{ax})}{X(\text{\ddot{a}q})} = e^{-\frac{\Delta G}{RT}} = e^{-\frac{-0.9}{0.6}} \approx 5$
- $X(\text{\ddot{a}q}) + X(\text{ax}) = 1 \Rightarrow X(\text{\ddot{a}q}) = \frac{5}{6}, X(\text{ax}) = \frac{1}{6}$
- Genau genommen müssten wir...

# Reaktion

- Reaktionsordnung: Wird experimentell bestimmt, ist die Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit von der Stoffkonzentration.
- Molekularität: Wie viele Teilchen sind am essentiellen Schritt der Reaktion beteiligt (radioaktiver Zerfall).
- Geschwindigkeitsbestimmender Schritt: Langsamste Reaktion in einem Set an Reaktionen.
- Vorgelagertes GGW: Wenn in einem Set an Reaktionen ein GGW gibt, das schneller ist als der geschwindigkeitsbestimmende Schritt.

# Diagramme



# Erste und Zweite Ordnung

Wir machen es nur vereinfacht, gehen nicht komplett ins Detail!

- Erste Ordnung:  $[A] \longrightarrow [P]$  und  $\frac{d[A]}{dt} = -k[A]$
- Zweite Ordnung:  $[A] + [B] \longrightarrow [P]$  und  $\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} = -k[A] \cdot [B]$

Was machen bei Set an Reaktionen? Einfach zusammen addieren!

## Vorgelagertes GGW

In einem Set an Reaktionen könnt ihr im Geschwindigkeitsgesetz manche Terme streichen, wenn sie viel kleiner sind als der Rest. Vorgelagertes GGW heißt dann einfach nur, dass Vor- und Rückreaktion gleich schnell sein müssen.

# Reaktionsset

- $\text{SO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{HOSO}_2$  mit  $k_1$
- $\text{HOSO}_2 \rightarrow \text{SO}_2 + \text{OH}$  mit  $k_{-1}$
- $\text{HOSO}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{SO}_3 + \text{O}_2\text{H}$  mit  $k_2$
- Und wir wissen, dass  $k_2 \ll k_1, k_{-1}$

Dann stellen wir für jeden Stoff das Geschwindigkeitsgesetz auf und nutzen das  $k_2$ , da es viel kleiner ist.

- $\frac{d[\text{SO}_2]}{dt} = -k_1[\text{SO}_2] \cdot [\text{OH}] + k_{-1}[\text{HOSO}_2]$
- $\frac{d[\text{OH}]}{dt} = -k_1[\text{SO}_2] \cdot [\text{OH}] + k_{-1}[\text{HOSO}_2]$
- $\frac{d[\text{HOSO}_2]}{dt} = +k_1[\text{SO}_2] \cdot [\text{OH}] - k_{-1}[\text{HOSO}_2] - k_2[\text{HOSO}_2] \cdot [\text{O}_2] = +k_1[\text{SO}_2] \cdot [\text{OH}] - k_{-1}[\text{HOSO}_2]$
- $\frac{d[\text{SO}_3]}{dt} = +k_2[\text{HOSO}_2] \cdot [\text{O}_2]$
- $\frac{d[\text{O}_2\text{H}]}{dt} = +k_2[\text{HOSO}_2] \cdot [\text{O}_2]$

Dann folgt:

- $k_1[\text{SO}_2] \cdot [\text{OH}] = k_{-1}[\text{HOSO}_2]$

und dann in die Gleichung für  $\text{HOSO}_2$  einsetzen!

## Priorität Serie 12

- 1
- 3
- 4
- 5
- 2

## Tipps Serie 12

- 1: Da es sich um ein GGW zwischen zwei Konformeren handelt, müssen ihre Anteile zusammenaddiert 1 ergeben. Wie kannst du damit die Gleichung vereinfachen?
- 2: Skript und Google
- 3: Welche der beiden Zustände muss also eine höhere Energie haben? Welcher liegt tiefer im Diagramm?
- 4: Was ist ein vorgelagertes Gleichgewicht, handelt es sich hier um eins? Und wenn ja, wie kann das die Gleichungen vereinfachen?
- 5: Stelle die Arrhenius-Gleichung für beide Reaktionen auf (einmal bei 300 K und einmal bei 310 K) und bilde dann die Differenz.

# Feedback

- Bitte füllt wieder das Feedback  aus, damit ich euch besser unterrichten kann :)

# Mental Health

- Unter diesem Link  findet ihr Hilfe, falls es euch nicht gut geht.

**Vielen Dank für eure  
Aufmerksamkeit!**

**Dominik Götz**  
[dgoetz@ethz.ch](mailto:dgoetz@ethz.ch)