

**Arrhenius-Gesetz:  $k = A \exp(-E_a/RT)$**

A "präexponentieller Faktor"

$$R = 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

1) Eine Reaktion erster Ordnung hat die Aktivierungsenergie  $E_a = 100 \text{ kJ/mol}$ ; der präexponentielle Faktor ist  $A = 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ . Bei welcher Temperatur, in  $^{\circ}\text{C}$ , hat die Reaktion eine Halbwertszeit  $t_{1/2} = 1 \text{ min}$ ?

1)  $k = \ln(2) / t_{1/2} = \ln(2) / 60 = 0,01155 \text{ s}^{-1}$ . ( $\text{s}^{-1}$  wegen der Einheit von A)

$$\ln(k / A) = -E_a / RT; T = (E_a / R) / \ln(A / k) =$$

$$= (100 \cdot 10^3 \text{ J/mol} / 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) / \ln(5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1} / 0,01155) = 334,07 \text{ K} \approx \mathbf{60,9 \text{ } ^{\circ}\text{C}}$$

{Nicht "übersehen", dass  $E_a$  üblicherweise in kJ/mol angegeben wird!}

2) Die "RGT-Regel" besagt, dass sich die Reaktionsgeschwindigkeit bei einer Erhöhung um  $10 \text{ } ^{\circ}\text{C}$  verdoppelt. Wie groß ist  $E_a$ , wenn diese Regel bei  $25 \text{ } ^{\circ}\text{C}$  gelten soll (die angegebene Temperatur als Anfang des Temperaturintervalls)?

2)  $k_1 = A \exp(-E_a/RT_1)$ ;  $k_2 = A \exp(-E_a/RT_2)$ ;

$$(k_1/k_2) = \exp(-E_a/RT_1) / \exp(-E_a/RT_2) = \exp[(E_a/R) (1/T_2 - 1/T_1)]$$

$$\ln(k_1/k_2) = (E_a/R) (1/T_2 - 1/T_1)$$

$$E_a = R \ln(k_1/k_2) / (1/T_2 - 1/T_1)$$

$$= 8,314 \ln(1/2) / (308,15^{-1} - 298,15^{-1}) = 52.946 \text{ J} \approx \mathbf{53 \text{ kJ/mol}}$$

3) Eine Reaktion hat bei  $300 \text{ K}$  die Geschwindigkeitskonstante  $k = 1,25 \text{ min}^{-1}$ . Wie groß ist  $k$  bei  $330 \text{ K}$ , wenn die Aktivierungsenergie in diesem Temperaturbereich  $57,05 \text{ kJ/mol}$  ist?

3)  $k_1 = A \exp(-E_a/RT_1)$ ;  $k_2 = A \exp(-E_a/RT_2)$ ;  $k_2 = k_1 \exp(+E_a/RT_1) \cdot \exp(-E_a/RT_2) =$

$$= k_1 \exp[(E_a/R) (1/T_1 - 1/T_2)] = 1,25 \exp[(57,05 \cdot 10^3 / 8,314) (300^{-1} - 330^{-1})] = \mathbf{9,999 \text{ min}^{-1}}$$

Das passt auch zur "RGT-Regel"; doppelte Geschwindigkeit bei  $10 \text{ } ^{\circ}\text{C}$  Temperaturerhöhung; für  $30 \text{ } ^{\circ}\text{C}$  also  $2^3 = 8$  mal schneller.

4) Eine Reaktion hat bei  $50 \text{ } ^{\circ}\text{C}$  die Geschwindigkeitskonstante  $2,22 \text{ s}^{-1}$ . Bei welcher Temperatur, in  $^{\circ}\text{C}$ , ist die Geschwindigkeitskonstante  $44,4 \text{ s}^{-1}$ , wenn die Aktivierungsenergie  $60,07 \text{ kJ/mol}$  ist?

4)  $\ln(k_1/k_2) = (E_a/R) (1/T_2 - 1/T_1)$ ; um "Übertragungsfehler" zu vermeiden, tabellarisch:

$$1: \quad 50 \text{ } ^{\circ}\text{C} \quad 323,15 \text{ K} \quad 2,22 \text{ s}^{-1}$$

$$2: \quad \quad \quad x \quad \quad \quad 44,4 \text{ s}^{-1}$$

$$(1/T_2) = \ln(k_1/k_2) (R/E_a) + (1/T_1) = \ln(2,22 / 44,4) (8,314 / 60.070) + 323,15^{-1} = 2,680 \cdot 10^{-3}$$

$$T_2 = 373,15 \text{ K} = \mathbf{100 \text{ } ^{\circ}\text{C}}$$