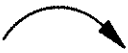


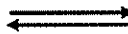
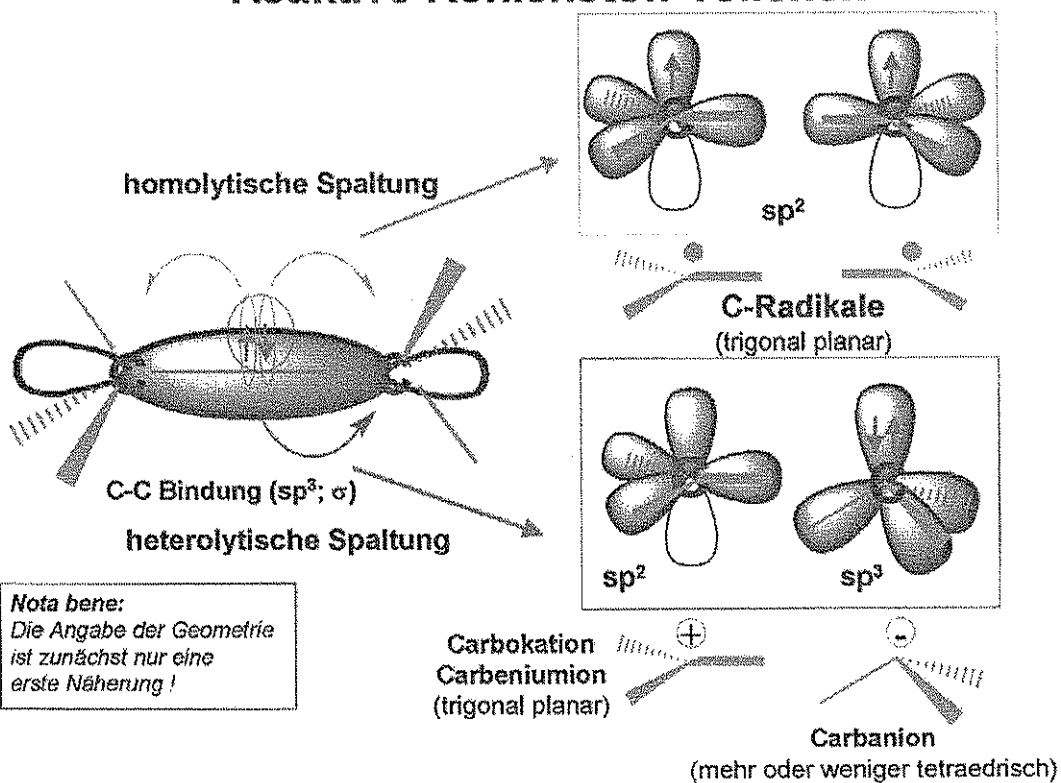


Symbole zur Formulierung von Reaktionen

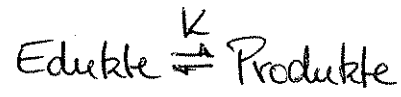
| Symbol | Beschreibung | bedeutet |
|---|-------------------------------------|--|
|  | Gebogener Pfeil "normale" Spitze | Verschiebung von <u>zwei</u> Elektronen in Pfeilrichtung; polare Reaktion |
|  | Gebogener Pfeil, "Fischhaken" | Verschiebung von <u>einem</u> Elektron, radikalische Reaktion |
|  | gerader Pfeil, einfach | Stoffumwandlung, <u>irreversible</u> Reaktion |
|  | gerade Pfeile, doppelt | Stoffumwandlung, <u>reversible</u> Reaktion |
| $h\nu$ | | Energiezufuhr durch elektromagnet. Strahlung; photochemische Reaktion |
| T oder Δ | | Energiezufuhr durch Wärme; thermische Reaktion |
| R | | Beliebiger Alkylrest |
| δ^+ | | positiv polarisiertes Atom |
| δ^- | | negativ polarisiertes Atom |

Reaktive Kohlenstoff-Teilchen



Organische Reaktionen: Thermodynamik + Kinetik

Thermodynamik, 2. Hauptsatz:



$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S = -RT \ln K$$

$$K = \frac{[\text{Produkte}]}{[\text{Edukte}]}$$

ΔG : Freie Reaktionsenthalpie (kJ/mol)

ΔH : Reaktionsenthalpie (kJ/mol)

ΔS : Reaktionsentropie (J/Kmol)

T: absolute Temperatur (K)

R: Gaskonstante (= 8.314 J/Kmol)

K: Gleichgewichtskonstante

$$\Delta G (= \Delta G_{\text{Produkte}} - \Delta G_{\text{Edukte}} \leftarrow \text{Freie Bildungsenthalpie})$$

$< 0 \Rightarrow K > 1$, Reaktion läuft in " \rightarrow "-Richtung ab

$> 0 \Rightarrow K < 1$, Reaktion läuft in " \leftarrow "-Richtung ab

$\Delta H \leq 0$: exotherme Reaktion

Abnahme von K bei Temperaturerhöhung

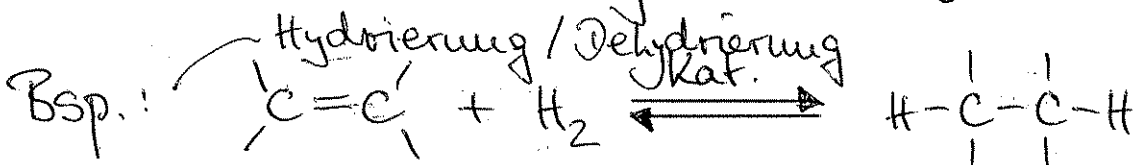
$\Delta H > 0$: endotherme Reaktion

Zunahme von K bei Temperaturerhöhung

$\Delta S > 0$: "Unordnung" nimmt zu beim Übergang
Edukte \rightarrow Produkte

(Erhöhung der Teilchenzahl, Ring \rightarrow Kette)

$\Delta S < 0$ "Unordnung" nimmt ab



$\Delta H < 0$ (exotherm), $\Delta S < 0$ (Teilchenzahl)

Raumtemperatur: $|\Delta H| > |T \Delta S| \Rightarrow \Delta G < 0 \Rightarrow K > 1$

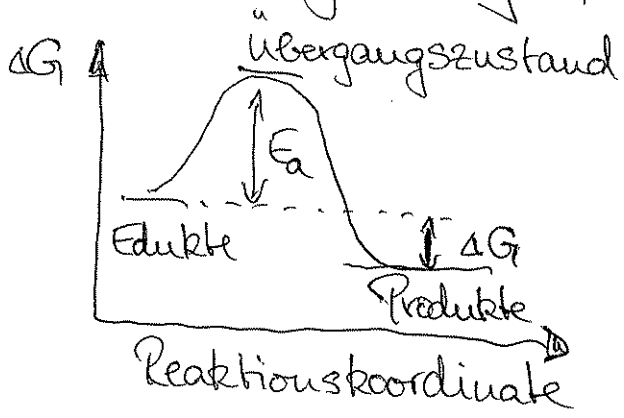
$\Delta H > 0$ (endotherm), $\Delta S > 0$

$|\Delta H| < |T \Delta S|$ wenn $T > 200^\circ\text{C}$

ΔG gibt an, ob eine Reaktion thermodynamisch möglich ist, sagt aber nichts aus über die Geschwindigkeit

Bsp: Knallgas-Reaktion $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$
stark exotherm; Reaktion aber erst nach Zündung, dann aber explosionsartig

→ Aktivierungsenergie, E_a



Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten

$$k = \underbrace{A}_{\text{Frequenzfaktor } (\propto \text{Aktivierungsentropie})} e^{-E_a/RT}$$

ARRHENIUS-Gleichung

→ Reaktion ist umso schneller je niedriger die Aktivierungsenergie und größer die -entropie

→ Faustregel: Bei einer Temperaturerhöhung um $10^\circ C$ steigt die Geschwindigkeit einer Reaktion um den Faktor 2-3.

Reaktion 1. Ordnung*: $A \rightarrow C$

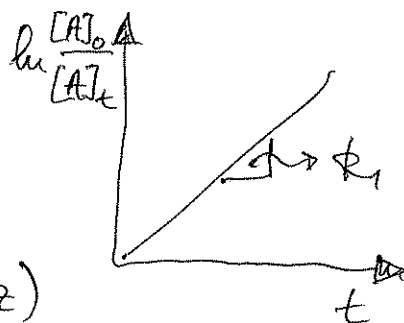
*Reaktionsordnung = Summe der Exponenten der Konzentrationen im Geschwindigkeitsgesetz

Geschwindigkeit, $r = - \frac{d[A]}{dt} = k_1 [A]^1$
 k_1 Geschwindigkeitskonstante

$$\Rightarrow \ln \frac{[A]_{t=0}}{[A]_t} = k_1 t$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k_1}$$

(Halbwertszeit, 50% Umsatz)



Reaktion 2. Ordnung: $A + B \rightarrow C$

$$r = - \frac{d[A]}{dt} = - \frac{d[B]}{dt} = k_2 [A]^1 [B]^1$$

$$[A] = [B] \Rightarrow r = - \frac{d[A]}{dt} = k_2 [A]^2$$

$$\Rightarrow \frac{1}{[A]_t} - \frac{1}{[A]_{t=0}} = k_2 t$$

$$t_{1/2} = \frac{1}{k_2 [A]_0}$$

