

Klausur
Bachelorstudiengang CBI / LSE

Physikalische Chemie

07.04.2011

Name: _____

Vorname: _____

geb. am: _____ **in:** _____

Studienfach: _____

Matrikelnummer: _____

Unterschrift: _____

Für die Beantwortung der Fragen verwenden Sie bitte den freigelassenen Raum, notfalls die Rückseite des Blattes sowie die Ersatzblätter. Soweit Erklärungen gefordert sind, schreiben Sie in Stichworten. Die in Klammern gesetzten Zahlen geben die Punktzahl an, die Sie bei erschöpfender Antwort auf die Frage erhalten. Die Kästchen am rechten Rand lassen Sie bitte frei.

Irgendwelche Hilfsmittel (Skripten, Bücher, etc.) sind nicht zugelassen!

Rydberg-Konstante $R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$ (entspricht 13.60 eV)

Lichtgeschwindigkeit $c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$

Elementarladung $e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ As}$

Plancksche Konstante $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

Avogadro-Konstante $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ Teilchen/mol}$

Bohrscher Radius $a_0 = 52.92 \text{ pm}$

Masse Proton $m_p = 1.673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ($\approx \text{amu}$)

Masse des Elektrons $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

Dielektrizitätskonst. d. Vak. $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ A s V}^{-1} \text{ m}^{-1}$

Gaskonstante $R = 8.31 \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Dieses Feld nicht beschriften!

A1	A2	A3	A4	A5	A6
12 P	7 P	7 P	10 P	14 P	10 P

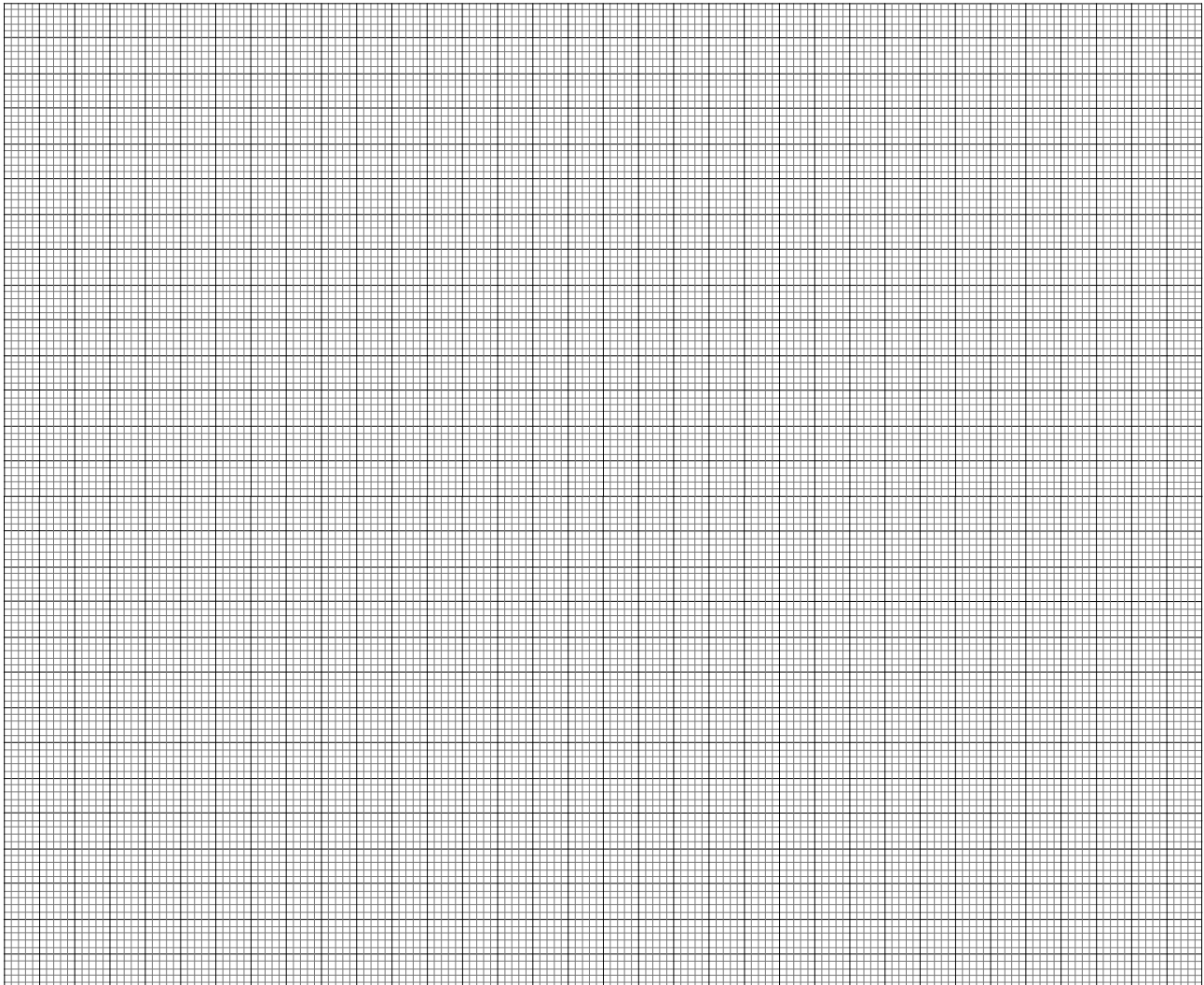
Ges.: 60P

Aufgabe 1 (Elementare Reaktionskinetik) (12 P)

Für die Zersetzung eines Gases A wurde bei 298 K, startend von einem Partialdruck von 12.0 Pa (bei $t = 0$ s), eine Halbwertszeit von 10.0 s gemessen. Die Reaktion verläuft nach einer Kinetik erster Ordnung.

(a) Berechnen Sie die Zeitkonstante und die Anfangsgeschwindigkeit der Reaktion (Einheiten angeben!) (4 P).

(b) Bei einer Temperaturerhöhung um 20 K verdoppelt sich die Geschwindigkeitskonstante. Erstellen Sie für die beiden Punkte eine Arrheniusauftragung. (3 P)

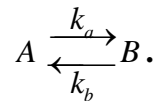


(c) Ermitteln Sie die Aktivierungsenergie und präexponentiellen Faktor. (3 P)

(d) Wie lange dauert es, bis ausgehend von einem Anfangsdruck von 20 Pa bei einer Reaktionstemperatur von 330 K 90 % des Gases zersetzt sind? (2P + 2 Zusatzpunkte)

Aufgabe 2 (Gleichgewicht und Relaxation) (7 P)

Wir betrachten folgendes Reaktionssystem im Gleichgewicht in Lösung:



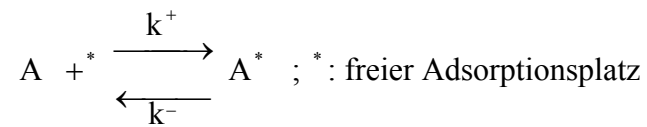
(a) Geben Sie die Geschwindigkeitsgesetze für die Bildung von A und B an. (2 P)

(b) Das Reaktionssystem wird durch eine plötzliche Änderung der Temperatur aus der Gleichgewichtslage gebracht. Leiten Sie einen Ausdruck für die Relaxationszeit zur Wiedereinstellung des Gleichgewichtes ab. (4 P)

(c) Experimentell wurde eine Relaxationszeit von 1.10 ms bestimmt. **Die Gleichgewichtskonzentrationen von A und B sind identisch.** Bestimmen Sie die Geschwindigkeitskonstanten. (1 P + 2 Zusatzpunkte)

Aufgabe 3 (Adsorption) (7 P)

Wir betrachten die molekulare Adsorption eines Gases A nach dem Langmuir'schen Adsorptionsmodell:



(a) Geben Sie die Geschwindigkeitsgesetze für die Bedeckung θ_A durch die Oberflächenspezies A und die Bedeckung θ^* durch freie Plätze an. (2 P)

(b) Leiten Sie aus dem Geschwindigkeitsgesetz in (a) die Langmuir-Isotherme für ein molekular adsorbierendes Gas ab. (4 P)

- (c) Skizzieren Sie den Verlauf der Oberflächenbedeckung als Funktion des Druckes für ein stärkeres und ein schwächeres Adsorbat nach dem Langmuir-Modell (Achten Sie dabei besonders auf die korrekte Darstellung des Verlaufs für kleine Drücke und des asymptotischen Verlaufs für große Drücke)! (1 P + 1 Zusatzpunkt)



Aufgabe 4 (Elementare Quantenmechanik) (10 P)

Wir betrachten eine Reaktion, bei der b Monomere A zu einem kettenförmigen Molekül A_b oligomerisieren:



Wir beschreiben ein Monomer als ein Teilchen im eindimensionalen Kasten mit der Länge $a = 0.31$ nm. Es entsteht bei der Reaktion ein Molekül der Länge $b \cdot a$.

- a. Geben sie die Schrödingergleichung für das Teilchen im Kasten an. (1 P)

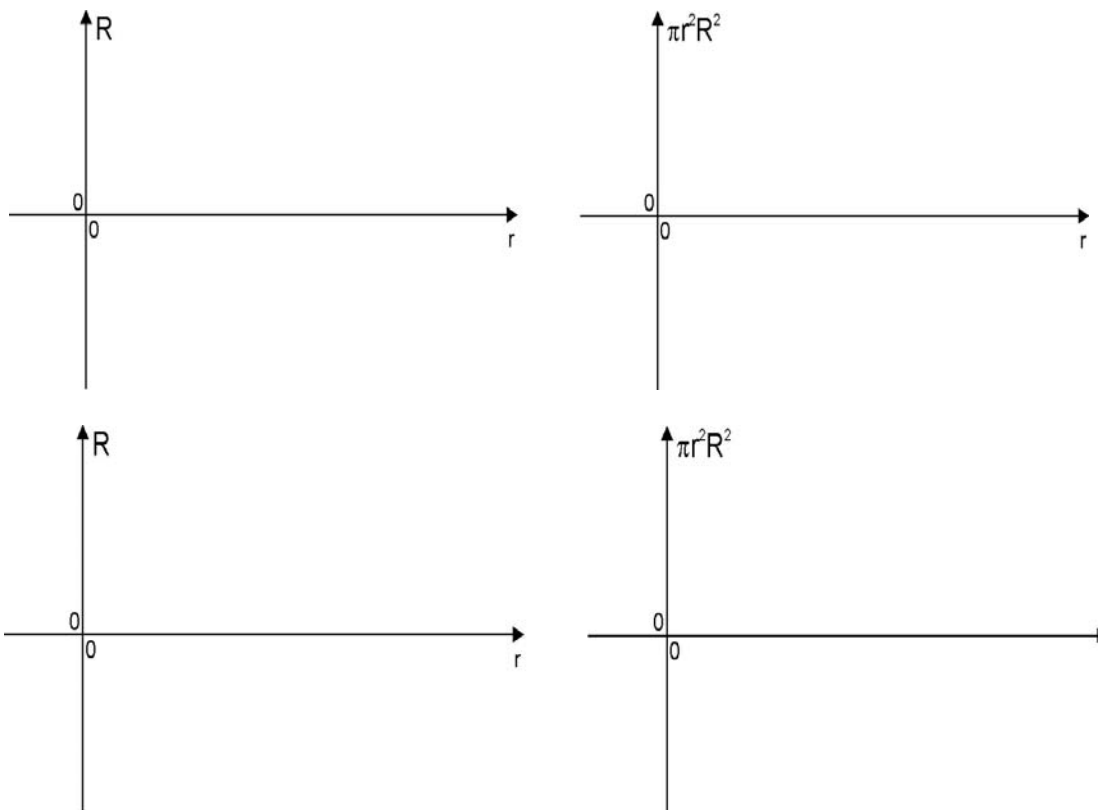
- b. Geben Sie einen Ausdruck für die Energieeigenwerte als Funktion der Oligomerlänge $b \cdot a$ an. (1 P)

- c. Zeichnen Sie in EIN GEMEINSAMES Energiediagramm die jeweils drei ersten Energieeigenwerte der Oligomere mit $b = 1$, $b = 2$ und $b = 3$ ein. (3 P)

- d. Zeichnen Sie die Wellenfunktionen zu den ersten drei Energieeigenwerten für das Oligomer $b = 2$. (2 P)
- e. Aus wie vielen Monomeren muss das Oligomer mindestens bestehen, damit es aus dem Grundzustand eine Absorptionslinie im sichtbaren Bereich, d.h. bei einer Wellenlänge > 400 nm zeigt? (3 P + 2 Zusatzpunkte)

Aufgabe 5 (Atome und Moleküle) (14 P)

- (a) Skizzieren Sie den Radialanteil $R(r)$ und die radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung $4\pi r^2 R(r)^2$ der atomaren Wellenfunktionen 4s und 4f. (2P)



- (b) Bestimmen Sie die möglichen Termsymbole für ein angeregtes H-Atom in der Konfiguration $3p^1 4d^1$. (3P)

- (c) Unter den verschiedenen Termen in (b) gibt es genau einen, der ein Gesamtdrehimpuls von $4.716 \cdot 10^{-34} \text{ kgm}^2\text{s}^{-1}$ aufweist? Geben Sie diesen Term an und zeigen Sie, dass Ihre Wahl richtig ist! Wie groß ist die Entartung dieses Terms? (3P)

- (d) Kürzlich wurde das CF^+ -Ion im interstellaren Raum entdeckt. Skizzieren Sie ein MO-Diagramm des Molekülions im Grundzustand. Bezeichnen Sie die MO-Orbitale vollständig und besetzen Sie diese mit Elektronen. (4 P)

(e) Ist das Molekül eher stabil oder eher instabil gegenüber einer Dissoziation unter Vakuumbedingungen? Begründung! (1 P)

(f) Geben Sie das Termsymbol für CF^+ im Grundzustand an. (1 P)

Aufgabe 6 (Spektroskopie) (10 P)

(a) Welche der folgenden Moleküle zeigen eine oder mehrere Banden im Rotationsabsorptionsspektrum (RA), Rotationsramanspektrum (RR), Schwingungsabsorptionsspektrum (SA), Schwingungsramanspektrum (SR)? (5 P)

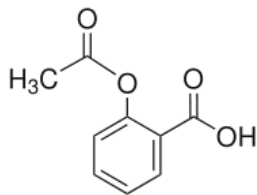
N₂: RA () RR () SA () SR ()

CF⁺: RA () RR () SA () SR ()

CF₄ (tetraedrisch) RA () RR () SA () SR ()

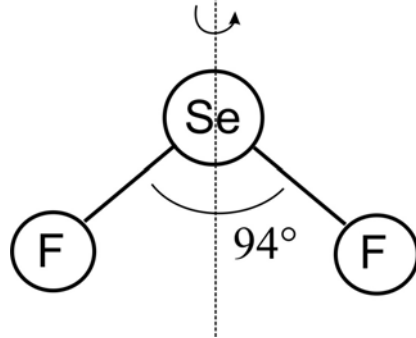
SF₆ (oktaedrisch) RA () RR () SA () SR ()

SF₅Cl: RA () RR () SA () SR ()

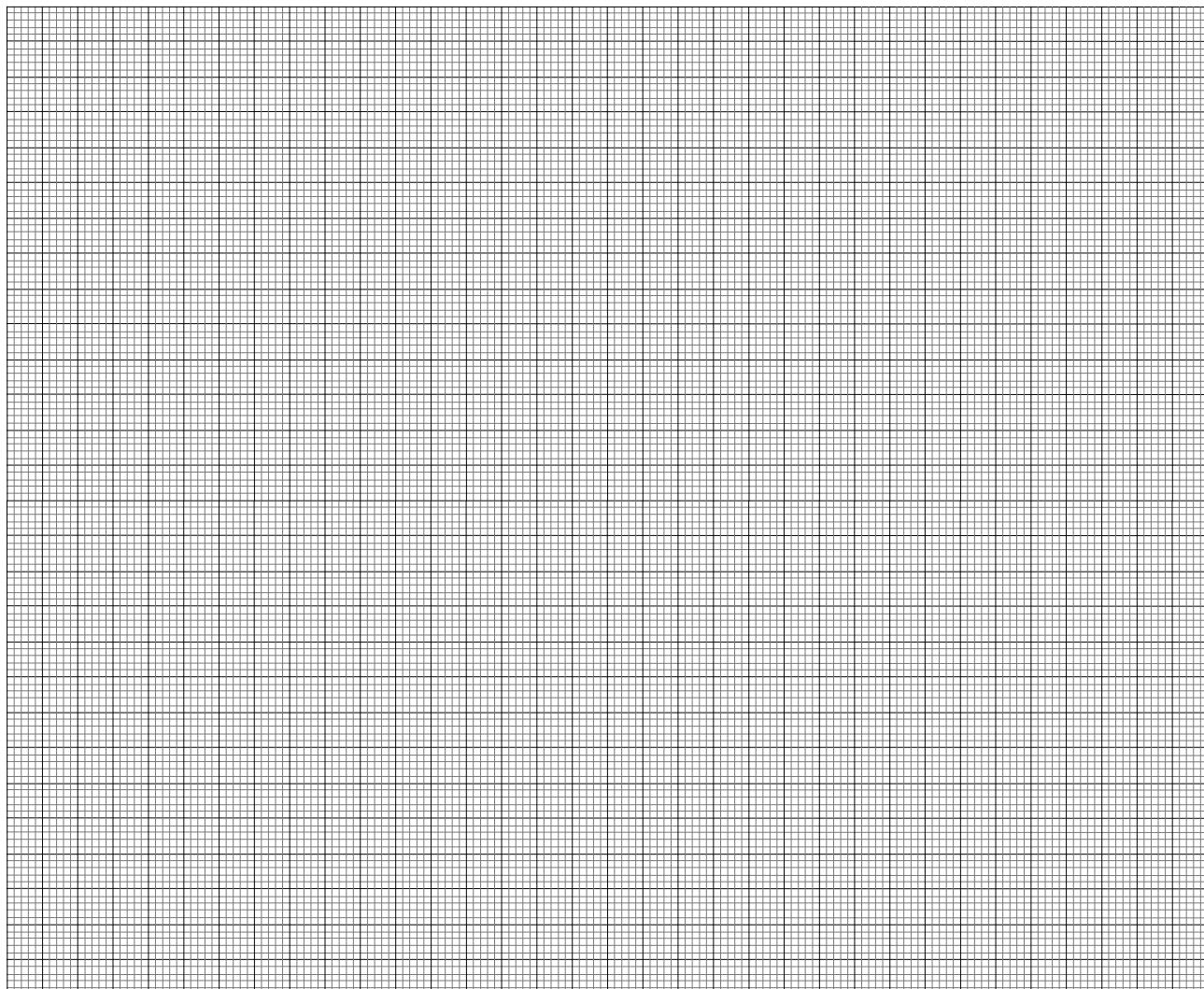


(Acetylsalicylsäure) RA () RR () SA () SR ()

(b) Für das gewinkelte Molekül Selendifluorid $^{80}\text{Se}^{19}\text{F}_2$ mit einem F-Se-F Bindungswinkel von 94° beträgt die Rotationskonstante für folgende Rotation $B = 0.28 \text{ cm}^{-1}$: Berechnen Sie die Se-F-Bindungslänge (5 P):



Zusatzblatt



Zusatzblatt