7. Übungsblatt (zu bearbeiten bis 11.12.2008)

1. Organische Halbleiter

Die elektrische Leitfähigkeit eines halbleitenden Perylen-Nanostäbchens wurde mit Hilfe eines Rastertunnelmikroskops mit vier Spitzen (four-probe scanning tunnelling microscope) als Funktion der Temperatur gemessen. Bestimmen Sie aus den in der Tabelle angegebenen Messwerten mit Hilfe einer geeigneten Auftragung die Bandlücke des Materials und geben Sie den Wert in J, kJ/mol und eV an!

T in K	170	185	225	235	250	275
κ in Ω^{-1}	4×10 ⁻⁷	1×10 ⁻⁶	3×10 ⁻⁶	4×10 ⁻⁶	6×10 ⁻⁶	1×10 ⁻⁵



Perylen

2. Stoßtheorie I

Die Rekombination von Methylradikalen ·CH3 gemäß

$$2 \cdot CH_3 \rightarrow C_2H_6$$
 und der Ratengleichung $\frac{d[C_2H_6]}{dt} = k[CH_3]^2$

hat bei 25°C einen experimentell bestimmten Frequenzfaktor von A = $2.4\cdot10^7$ m³ mol⁻¹ s⁻¹. Das Methylradikal kann als planar mit einem C—H-Bindungsabstand von 0.11 nm angenommen werden. Berechnen Sie den Stoßquerschnitt σ [m²] und daraus den sterischen Faktor p, der sich aus einem Vergleich des experimentell gemessenen Frequenzfaktors A_{exp} mit dem theoretisch vorhergesagten Faktor A_{theor} unter der Voraussetzung der Identität der Raten ergibt. Der Stoßquerschnitt ist definiert als die effektive Fläche des Methylradikals.

3. Stoßtheorie II (optionale Zusatzaufgabe)

Bei Temperaturen unterhalb von 800 K erfolgt die Dimerisierung von Tetrafluorethylen

$$2C_2F_4 \xrightarrow{k_2} cyclo-C_4F_8$$

nach einem Zeitgesetz zweiter Ordnung mit

$$k_2 = 10^{11.07} \exp\left(-\frac{107 \, kJ/mol}{RT}\right) \cdot \frac{cm^3}{mol \cdot s}$$
.

Der C_2F_4 -Moleküldurchmesser beträgt d = $5.12 \cdot 10^{-10}$ m. Berechnen Sie k_2 mit Hilfe der einfachen Stoßtheorie und schätzen Sie den sterischen Faktor p bei 725 K ab!