

Reaktion erster Ordnung

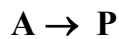
Peter Keusch Universität Regensburg

http://www.uni-regensburg.de/Fakultaeten/nat_Fak_IV/Organische_Chemie/Didaktik/Keusch/index.html

Computergestützte Experimente- Chemische Kinetik

- Hydrolyse des tertiären Butylchlorids

Eine Reaktion



In der **A** der Reactant und **P** das Produkt ist, wird als Reaktion erster Ordnung bezeichnet. Die Reaktionsgeschwindigkeit ist der Konzentration eines Reaktionspartners proportional.

Die zeitliche Abnahme der Konzentration von **A** kann wie folgt beschrieben werden:

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k[A] \quad (1)$$

$$-\frac{d[A]}{[A]} = k dt \quad (2)$$

Gleichung (2) stellt die differenzierte Form des Zeitgesetzes dar. Durch Integration dieser Gleichung und Bestimmung der Integrationskonstanten **C** erhält man das entsprechende Zeitgesetz in integrierter Form.

Integration der Gleichung (2) gibt:

$$\ln[A] = -kt + C \quad (3)$$

Zu Beginn der Reaktion ($t = 0$) ist die Konzentration von **A** $[A]_0$. Für $\ln[A]_0$ ergibt sich:

$$\ln[A]_0 = -k(0) + C \quad (4)$$

Deshalb

$$C = \ln[A]_0 \quad (5)$$

Es folgt damit:

$$\ln \frac{[A]}{[A]_0} = -k t \quad (6)$$

Die Auftragung von $\ln [A]$ bzw $\ln [A] / [A]_0$ gegen die Zeit ergibt eine Gerade mit der Steigung $-k$. Die Auftragung sollte bis zu einem Reaktionsumsatz von 80-90% linear sein.

Gleichung (6) kann auch wie folgt formuliert werden:

$$[A] = [A]_0 e^{-k t} \quad (7)$$

Die Gleichung zeigt, dass die Konzentration von A mit der Zeit exponentiell abnimmt,

Die Geschwindigkeitskonstante k kann auch aus der Halbwertszeit $t_{1/2}$ bestimmt werden.

Es gilt entsprechend Gleichung (6):

$$k t_{1/2} = \ln \frac{[A]_0}{[A]_0 / 2} \quad \text{bzw.} \quad k = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} \quad (8)$$