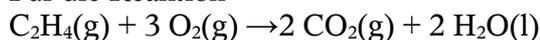


## Aufgaben zur Veranstaltung „Chemisches Rechnen“

Prof. Dr. T. Klüner

### Aufgabe 12.1:

Für die Reaktion

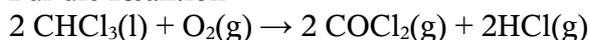


bei 25°C ist  $\Delta H^0 = -1410,8 \text{ kJ/mol}$ . Wie groß ist die Reaktionsenergie  $\Delta U^0$ ?

1 Punkte

### Aufgabe 12.2:

Für die Reaktion



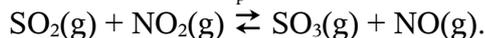
ist  $\Delta S^0 = 340 \text{ J/(mol K)}$  und  $\Delta H^0 = -366 \text{ kJ/mol}$ . Wie groß ist  $\Delta G^0$ ? Verläuft die Bildung des giftigen Gases Phosgen ( $\text{COCl}_2$ ) aus Chloroform ( $\text{CHCl}_3$ ) freiwillig bei 25°C?

2 Punkte

### Zusatzaufgaben (fakultativ)

### Aufgabe 12.3:

Bestimmen Sie  $K_p$  für die Reaktion



Verwenden Sie folgende Werte für die freie Standard-Bildungsenthalpien:

$\Delta G_f^0(\text{SO}_3) = -370,37 \text{ kJ/mol}$ ,  $\Delta G_f^0(\text{SO}_2) = -300,37 \text{ kJ/mol}$ ,  $\Delta G_f^0(\text{NO}_2) = +51,84 \text{ kJ/mol}$ ,  
 $\Delta G_f^0(\text{NO}) = +86,69 \text{ kJ/mol}$ .

3 Punkte

### Aufgabe 12.4:

Nehmen Sie an, es gäbe theoretisch ein Universum, in welchem sich der Zustand eines Elektrons in einem Mehrelektronenatom durch nur drei Quantenzahlen beschreiben ließe, aber ansonsten die Regeln der Quantenmechanik (Aufbauprinzip, Pauli-Prinzip, Hund'sche Regel) gelten. Für die Quantenzahlen sollen folgende Bedingungen gelten:

- Hauptquantenzahl:  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$
- Unterquantenzahl:  $q = -(n-1), \dots, 0, \dots, (n-1)$  (gibt es in unserem Universum nicht !)
- Spinquantenzahl:  $m_s = \pm 1/2$
- für gegebenes  $n$  steige die Orbitalenergie mit steigendem Betrag von  $q$
- Orbitale mit gleichem Betrag von  $q$  für gegebenes  $n$  seien entartet
- die Orbitalenergie des Niveaus ( $n=4, q=0$ ) sei kleiner als die des Niveaus ( $n=3, |q|=2$ )

a) Konstruieren Sie ein Periodensystem der Elemente für dieses Universum (1. bis 4. Periode)

b) Welche Ordnungszahlen haben die Edelgase in der Dreiquantenwelt?

c) Vergleichen Sie die erste Ionisierungsenergie der Elemente mit der Ordnungszahl 10 und 11 in dem theoretischen Universum. Welche Ionisierungsenergie ist größer?

4 Punkte

### Aufgabe 12.5:

Elektronisch angeregtes Helium hat die Elektronenkonfiguration  $1s^1 2s^1$ .

a) Wieviele elektronische Zustände gibt es für diese Elektronenkonfiguration und welche Spinmultiplizitäten haben diese?

b) Geben Sie für den Zustand mit der größten Spinmultiplizität eine Wellenfunktion an, die mit dem Pauli-Prinzip verträglich ist.

4 Punkte

Hinweis: Bei allen Aufgaben muss der Lösungsweg erkennbar sein! Für das Aufschreiben des Endergebnisses allein gibt es keine volle Punktzahl.