

Neubetrachtung der Arrhenius-Gleichung in der chemischen Kinetik zur Analyse von Kinetikdaten für photochrome Naphthoxazin-Spiro-Indoline

Jonathan Hobley

OndaLabs R&D Beratung, Deca Homes, Clark Free-Port, Barangay Margot, Angeles, 2009, Philippinen

ABSTRAKT

In den Bachelorstudiengängen werden Kinetik und Thermodynamik oft als separate Module unterrichtet. Das liegt daran, dass die Gleichgewichtsdaten aus der Thermodynamik keinen Aufschluss über die Geschwindigkeit der Gleichgewichtserreichung geben, weil es sich um die Kinetik handelt. Es ist richtig, dass eine chemische Reaktion, selbst wenn sie thermodynamisch günstig ist, aus kinetischen Gründen niemals ablaufen kann. Jedoch ist diese Trennung von Kinetik und Thermodynamik in mancher Hinsicht bedauerlich. In dieser Arbeit wird die Verbindung zwischen der chemischen Kinetik und der Thermodynamik untersucht, basierend darauf, dass beide durch ein einziges Potential-Energie-Diagramm definiert werden. Ein geläufiger Irrtum, der in den Fächern in den Grundstudiengängen zur chemischen Kinetik verursacht wurde, ist die Behauptung, dass die Arrhenius-Gleichung mangelhaft ist, weil sie keine präzise Bedeutung für den präexponentiellen Faktor A bietet. Grundstudienfächer setzen häufig fort, komplexere Theorien zu bieten, in Form der Kollisionstheorie CT (engl.) und der Übergangszustandstheorie TST (engl.), die in der Eyring-Gleichung resultieren. Diese beiden letztgenannten Theorien sind erforderlich, um formal zu zeigen, dass der präexponentielle Faktor Informationen über die Entropieanforderungen der Reaktion enthält. In dieser Arbeit wird gezeigt, dass in Anbetracht der Verbindung zwischen der Thermodynamik und der Kinetik gezeigt werden kann, dass A bereits implizit mit dem Produkt der Aktivierung der Entropie der Reaktion und der Eigenfrequenz der Reaktion verbunden war. Diese Arbeit nutzt die zuvor

veröffentlichten und unveröffentlichten Ergebnisse zu photochromen Naphthoxazin-Spiro-Indolinen zum Vergleich verschiedener Theorien.

Schlüsselwörter: *Arrhenius-Gleichung, Theorie des Übergangszustandes, Kollisionstheorie, Naphthoxazin-Spiro-Indolin, photochrome, chemische Kinetik*