

Physikalische Chemie: Kinetik

Prof. Thiemann
SS 2002

Protokoll

Versuch 1

« Die Bestimmung der Aktivierungsenergie der
Inversionsreaktion von Rohrzucker »

Praktikumtermin:
06.05.02

Gruppe 12
Andrea Vöge
Dominique Schobes

Inhalt:

1. Theorie

2. Zusatzfragen

Inversionsreaktion

optische Aktivität in Zusammenhang mit der Struktur eines Moleküls

Funktion eines Polarimeters

3. Geräte und Reagenzien

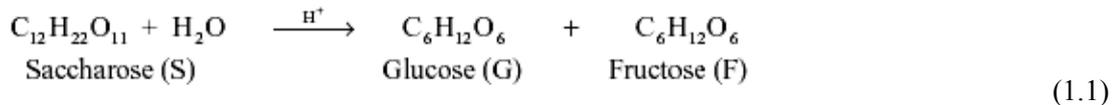
4. Versuchsdurchführung

5. Aufgaben/ Auswertung

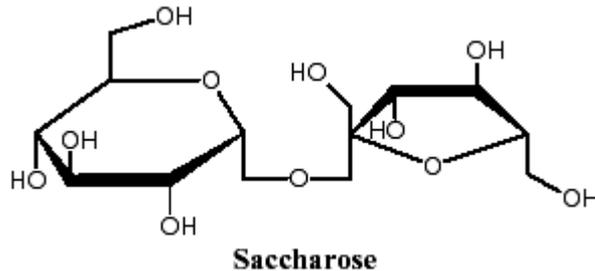
6. Fehlerbetrachtung

1. Theorie

Die Inversionsreaktion von Rohrzucker (Saccharose) wird durch Protonen katalysiert.



Die Saccharose ist ein α -D-Glucopyranosyl- β -D-fructofuranosid, ist also aus einer α -D-Glucose und einer β -D-Fructose aufgebaut. Die Fructose muss für die Bindung um 180° gedreht werden.



Die Saccharose hydrolysiert in wässriger Lösung protonenkatalysiert zu D-(-)-Fructose und D-(+)-Glucose. Bei dieser Säurehydrolyse wird die Sauerstoffbrücke protoniert und schließlich hydrolytisch gespalten. Hierbei gilt folgender Mechanismus:



mit:

$$K = \frac{c_{\text{SH}^+}}{c_{\text{S}} \cdot c_{\text{H}^+}} \quad (1.3)$$

Die Folgereaktion verläuft nach dem Schema:



mit:

$$k' = \frac{c_{\text{G}} \cdot c_{\text{F}} \cdot c_{\text{H}^+}}{c_{\text{SH}^+} \cdot c_{\text{H}_2\text{O}}}$$

Der langsamste und damit geschwindigkeitsbestimmende Schritt ist die Spaltung der Saccharose durch den Angriff des Wassers mit der Gleichgewichtskonstanten k' .

Da in verdünnter wässriger Lösung gearbeitet wird, kann die Konzentration des Wassers als konstant angesehen und in die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante k mit einbezogen werden.

Damit ergibt sich für die Abnahme von Saccharose folgende Differentialgleichung:

$$-\frac{dc_{\text{S}}}{dt} = k' \cdot c_{\text{SH}^+} = k' \cdot K \cdot c_{\text{S}} \cdot c_{\text{H}^+} \quad (1.5)$$

Da die H^+ -Ionen nur katalytisch wirken sollen und daher in der Reaktion (1.1) nicht verbraucht werden, ist auch c_{H^+} eine Konstante und kann in eine neue Reaktionsgeschwindigkeitskonstante k mit einbezogen werden:

$$k = k' \cdot K \cdot c_{\text{H}^+} \quad (1.5.1)$$

Damit ergibt sich für die Abnahme von $[\text{S}]$ mit der Zeit ein einfaches Reaktionsgeschwindigkeitsgesetz 1. Ordnung:

$$-\frac{dc_{\text{S}}}{dt} = k \cdot c_{\text{S}} \quad (1.6)$$

Nach Separation der Variablen folgt durch Integration mit der Randbedingung für $t = t_0$ ist $c_S = c_0$:

$$\ln \frac{c_0}{c_S} = k \cdot (t - t_0) \quad (1.7)$$

Zur Verfolgung der Reaktion wird die Änderung der optischen Drehung ausgenutzt. Sowohl die Ausgangssubstanz Saccharose [**S**] als auch die Produkte Glucose [**G**] und Fructose [**F**] drehen die Ebene des polarisierten Lichtes um einen bestimmten Winkel nach rechts oder links. Für den Betrag des Drehwinkels gilt nach:

$$\alpha = [\alpha]_x \cdot d \cdot c_x \quad (1.8)$$

mit $[\alpha]_x$ = spezifische Drehung einer beliebigen Substanz x
 d = Schichtdicke der durchstrahlten Messprobe
 c_x = Konzentration der Substanz x

Die äquimolare Mischung aus Glucose und Fructose wird als Invertzucker bezeichnet. Saccharose dreht die Ebene des polarisierten Lichtes nach rechts (positiv), Invertzucker dagegen nach links (negativ).

Der beobachtete Drehwinkel wird daher während der Reaktion kleiner.

Es gilt für den Drehwinkel, zu dem alle beteiligten optisch aktiven Komponenten beisteuern, nach (1.8):

$$\begin{aligned} \alpha &= ([\alpha]_S \cdot c_S + [\alpha]_J \cdot c_J) \cdot d \\ &= d([\alpha]_S c_S + [\alpha]_J (c_0 - c_S)) \end{aligned} \quad (1.9)$$

Da zu jeder Zeit t $c_J = c_0 - c_S$ ist, ergibt sich:

$$c_S = \frac{\alpha - [\alpha]_J d \cdot c_0}{([\alpha]_S - [\alpha]_J) d} \quad (1.10)$$

und

$$c_0 = \frac{\alpha_0 - [\alpha]_J d \cdot c_0}{([\alpha]_S - [\alpha]_J) d} \quad (1.11)$$

und

$$\frac{c_0}{c_S} = \frac{\alpha_0 - [\alpha]_J d \cdot c_0}{\alpha - [\alpha]_J d \cdot c_0} \quad (1.12)$$

Aus Gleichung (1.9) ergibt sich nun für eine unendlich lange Zeit $[t_\infty]$:

$$t \rightarrow t_\infty, \alpha \rightarrow \alpha_\infty = [\alpha]_J c_0 \cdot d \quad (1.13)$$

Damit erhält man durch Einsetzen von (1.13) in (1.12) und (1.12) in (1.7):

$$\ln \frac{\alpha_0 - \alpha_\infty}{\alpha - \alpha_\infty} = k(t - t_0) \quad (1.14)$$

Die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante k ist nach dieser Beziehung aus den Drehwinkelablesungen während der Reaktion berechenbar:

$$\ln\left(\frac{\alpha_0 - \alpha_\infty}{\alpha - \alpha_\infty}\right) \quad \text{gegen } t \text{ auftragen } (t = t_0) \quad (1.14.1)$$

Dies ist eine Gleichung, die in ähnlicher Form weitgehend zur Auswertung reaktionskinetischer Daten dient. In diesem Fall lassen sich die Drehwinkel α_0 , α_∞ und α zu jedem Zeitpunkt leicht beobachten. Aus ihnen lässt sich sofort auf graphischem Wege die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante k bestimmen.

Nach dem Arrhenius-Gesetz lässt sich aus der Änderung der Geschwindigkeitskonstante k mit der Temperatur T die Aktivierungsenergie berechnen:

$$k = A \cdot e^{-E_A/RT} \quad (1.15)$$

mit A = Frequenzfaktor der Reaktion
 R = Allgemeine Gaskonstante
 E_A = molare Aktivierungsenergie

Wenn k_0 die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante bei der Temperatur T_0 bedeutet,

$$k_0 = A \cdot e^{-E_A/RT_0} \quad (1.16)$$

dann ergibt sich durch Division von (1.15) durch (1.16) und Umformung:

$$\ln \frac{k}{k_0} = \frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \quad (1.17)$$

Trägt man nun $\ln\left(\frac{k}{k_0}\right)$ als Funktion von $\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)$ auf, so ergibt sich aus der Steigung die gesuchte Aktivierungsenergie der Reaktion, wenn k bei verschiedenen Temperaturen bestimmt wurde.

Gleichung (1.17) ist natürlich auch berechenbar. Die graphische Auswertung ist ohne größeren Rechenaufwand genauer. Solange die Zeit zur Verfügung steht, sollte man aber auch in jedem Fall graphische und numerische Auftragung nebeneinander machen, um sich so von der Richtigkeit des Ergebnisses zu überzeugen.

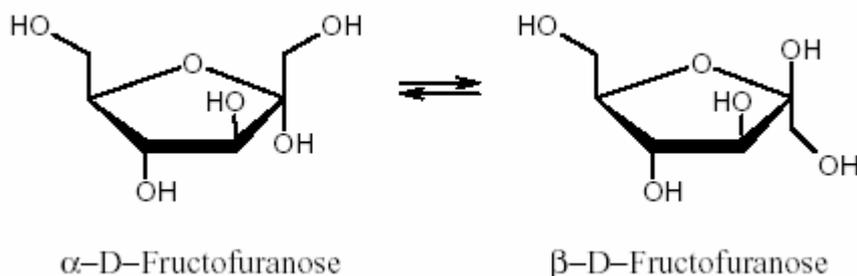
2. Zusatzfragen

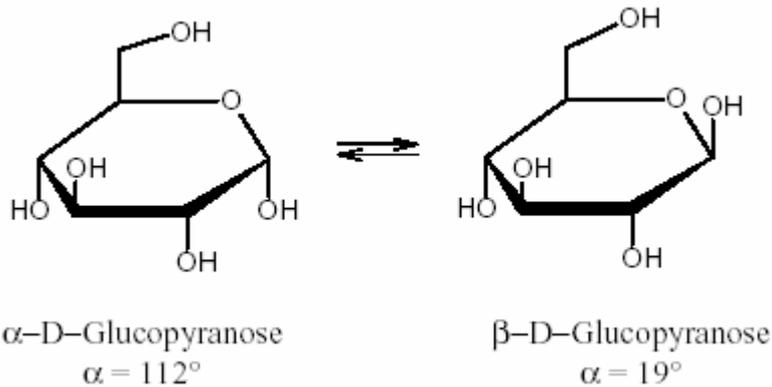
Inversionsreaktion

Inversion ist die Bezeichnung für die Spaltung der die Polarisationssebene linear polarisierten Lichtes nach rechts drehenden Saccharose (Rohrzucker) in ein Gemisch aus gleichen Teilen von Glucose und Fructose durch verdünnte Säuren oder das Enzym Invertase. Die Polarisationssebene des Lichtes wird durch das Gemisch (Invertzucker) nach links gedreht, da D-Fructose stärker links- als D-Glucose rechtsdrehend ist. Die Geschwindigkeit der Inversion (technisch bedeutende Hydrolyse-Reaktion) kann man bei gegebener Saccharose-Lösung mit dem Polarimeter anhand der fortschreitenden Drehung gut verfolgen. Die Inversion der Saccharose ist eine der frühesten bekannt gewordenen katalytischen Reaktionen der organischen Chemie.

optische Aktivität in Zusammenhang mit der Struktur eines Moleküls

Die Ursache der optischen Aktivität ist das Auftreten von Spiegelbildisomerie (Chiralität). Enthält eine organische Substanz ein asymmetrisches C-Atom, also ein C-Atom mit vier verschiedenen Substituenten, so ist dieses Molekül mit seinem Spiegelbild nicht zur Deckung zu bringen. Man nennt zwei Moleküle, die sich wie Bild und Spiegelbild verhalten, Enantiomere. Bis auf das Verhalten gegenüber polarisiertem Licht sind ihre physikalischen Eigenschaften identisch. Sowohl von der Fructose als auch von der Glucose existieren zwei enantiomere Formen. Diese können sich durch Ringöffnungen, Umlagerung und anschließende Recyclisierung ineinander umwandeln. Man unterscheidet jeweils zwischen der α - und der β -Form, die sich durch die Stellung einer Hydroxygruppe unterscheiden.

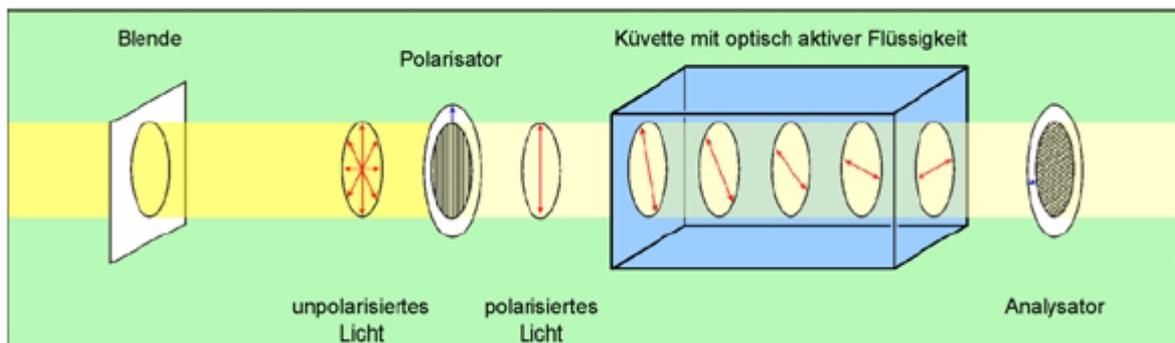




Ein äquimolares Gemisch zwei enantiomerer Formen wird Racemat genannt. Saccharose und Glucose sind rechtsdrehend, während Fructose linksdrehend ist. Da der spezifische Drehwinkel der F größer ist als derjenige der G, ist das Gemisch der beiden linksdrehend. Die Umkehrung des Drehwinkels einer Lösung wird Inversion genannt.

Funktion eines Polarimeters

Die Konzentrationsänderungen während der Reaktion lassen sich unter Ausnutzung der optischen Aktivität von Edukt und Produkten mit Hilfe der Polarimetrie bestimmen. Optisch aktive Substanzen drehen die Schwingungsebene polarisierten Lichts. Der Drehwinkel β ist substanzspezifisch, rechtsdrehende Verbindungen werden mit einem (+), linksdrehende mit einem (-) gekennzeichnet. Die Richtung und Größe der Drehung einer Lösung wird mit Hilfe eines Polarimeters bestimmt.



Der ankommende, monochromatische Lichtstrahl passiert eine Blende. Das parallele Lichtbündel schwingt in sämtlichen Ebenen, die quer zur Ausbreitungsrichtung stehen. Der Lichtstrahl trifft dann auf einen Polarisator, der ihn derart filtert, dass das herauskommende Licht nur noch in einer Ebene schwingt; es ist polarisiert. Das Licht wird daraufhin durch eine Küvette mit der gelösten, zu untersuchenden Substanz geleitet. Ist jene optisch aktiv, so dreht sie die Schwingungsebene des Strahls um einen bestimmten Winkel α , der sich mit Hilfe eines nachgeschalteten Polarisators, den Analysator, durch ein Okular ablesen lässt. Um α zu bestimmen, stellt man erst die Stellung der Schwingungsebene ein, wenn der Lichtstrahl durch eine Küvette mit einer optisch inaktiven Substanz (meist Wasser) fällt und richtet den Analysator so aus, dass die Lichtintensität maximal geschwächt wird.

Der zweite Polarisator ist dann im Vergleich zum ersten um 90° gedreht. Wird die Schwingungsebene von der zu messenden Substanz verändert, stellt man den zweiten Polarisator wieder auf die maximale Auslöschung und kann dann den Winkel bezüglich der ersten und zweiten Stellung und ablesen.

3. Geräte und Reagenzien

Geräte

- Polarimeter nach Mitscherlich
- Thermostat und 1 Messzelle ($d = 20 \text{ cm}$)

Chemikalien

- Rohrzuckerlösung [0,5 mol/l]
- HCl-Lösung [2 mol/l]

Sicherheit

Salzsäure HCl

R 34 Verursacht Verätzungen

R 37 Reizt die Atmungsorgane

S 26 Bei Berührung mit den Augen sofort gründlich mit Wasser abspülen und den Arzt konsultieren

S 36/37/39 Bei der Arbeit geeignete Schutzkleidung, Schutzhandschuhe und Schutzbrille/Gesichtsschutz tragen

S 45 Bei Unfall oder Unwohlsein sofort Arzt hinzuziehen (wenn möglich dieses Etikett vorzeigen)

C Ätzend

4. Versuchsdurchführung

Eine Rohrzuckerlösung [**A** = 0,5 mol/l] und eine HCl-Lösung [**B** = 2 mol/l] werden unabhängig von einander auf 20°C in dem Thermostat vortemperiert. Das Polarimeterrohr wird auch mittels des Thermostates auf 20°C temperiert.

Um die Messung durchführen zu können werden je 20 ml der Lösung (**A**) und (**B**) entnommen und in einem Becherglas vermischt. Bei diesem Vorgang setzt man die Stoppuhr in Gang [t_0].

Mit der Mischung füllt man schnell und blasenfrei das Polarimeterrohr. Nach Einsetzen des Rohres wird der Okulartubus scharf eingestellt, man verdreht den Analysator so lange, bis beide Feldhälften gleich hell erscheinen und notiert den abgelesenen Drehwinkel.

Gleiche Helligkeit erzielt man bei zwei, um 180° verschiedenen Winkeleinstellungen. Es ist auf den Punkt minimaler Helligkeit einzustellen. Der Drehwinkel wird in kurzen Zeitabständen (0,5 min) abgelesen.

Die Messungen werden nach gleichem Versuchsschema für 25°C und 30°C wiederholt. Jede Messreihe sollte ca. 20 min verfolgt werden.

Den Wert α_0 erhält man durch Extrapolation der Messpunkte auf den Zeitpunkt t_0 . Es ist darauf zu achten, dass der spezifische Winkel $[\alpha]_{s,j}$ selbst von der Temperatur abhängt. Die erhaltenen **$[\alpha]$ -Werte** sind für jede Temperatur unterschiedlich.

um α_∞ zu erhalten verfährt man folgendermaßen:

Ein Messkolben wird mit 25 ml der Messlösung (12,5 ml Rohrzuckerlösung + 12,5 ml HCL) gefüllt, dieser wird im Wasserbad von ca. 70°C ca. 20 min lang erwärmt und danach auf 20°C abgekühlt. Dann füllt man die Lösung ins Polarimeterrohr und misst den Drehwinkel.

5. Aufgaben/ Auswertung

Aufgabe 1.2.1: Bestimmung von **k** für die Inversionsreaktion von Rohrzucker bei drei verschiedenen Temperaturen [20°C, 25°C und 30°C mit $c_{H^+} = 1 \text{ mol/l}$]

Aufgabe 1.2.2: Berechnung der Aktivierungsenergie E_A aus den erhaltenen Werten.

Aufgabe 1.2.3: Angabe nach welcher Zeit die Hälfte der Saccharose bei Temperaturen von 0°C, 25°C und 100°C reagiert hätte [$t_{1/2} = \ln 2 / k$]

Auswertung

Messprotokolle:

α_0 wird durch Extrapolation für $t = 0$ ermittelt.

α_0 entspricht der Steigung der Ausgleichsgeraden.

α_∞ , d.h. der Drehwinkel nach vollständiger Hydrolyse wird bestimmt, indem man eine mit Säure versetzte Rohrzuckerlösung ca. 20 min. bei etwa 70°C erwärmt und anschließend zur Messung des Drehwinkels wieder auf 20°C runterkühlt.

$$\alpha_\infty = -3,55^\circ$$

bei 20°C (293,15 K)

$$\alpha_0(20^\circ\text{C}) = 11,208$$

bei 25°C (298,15 K)

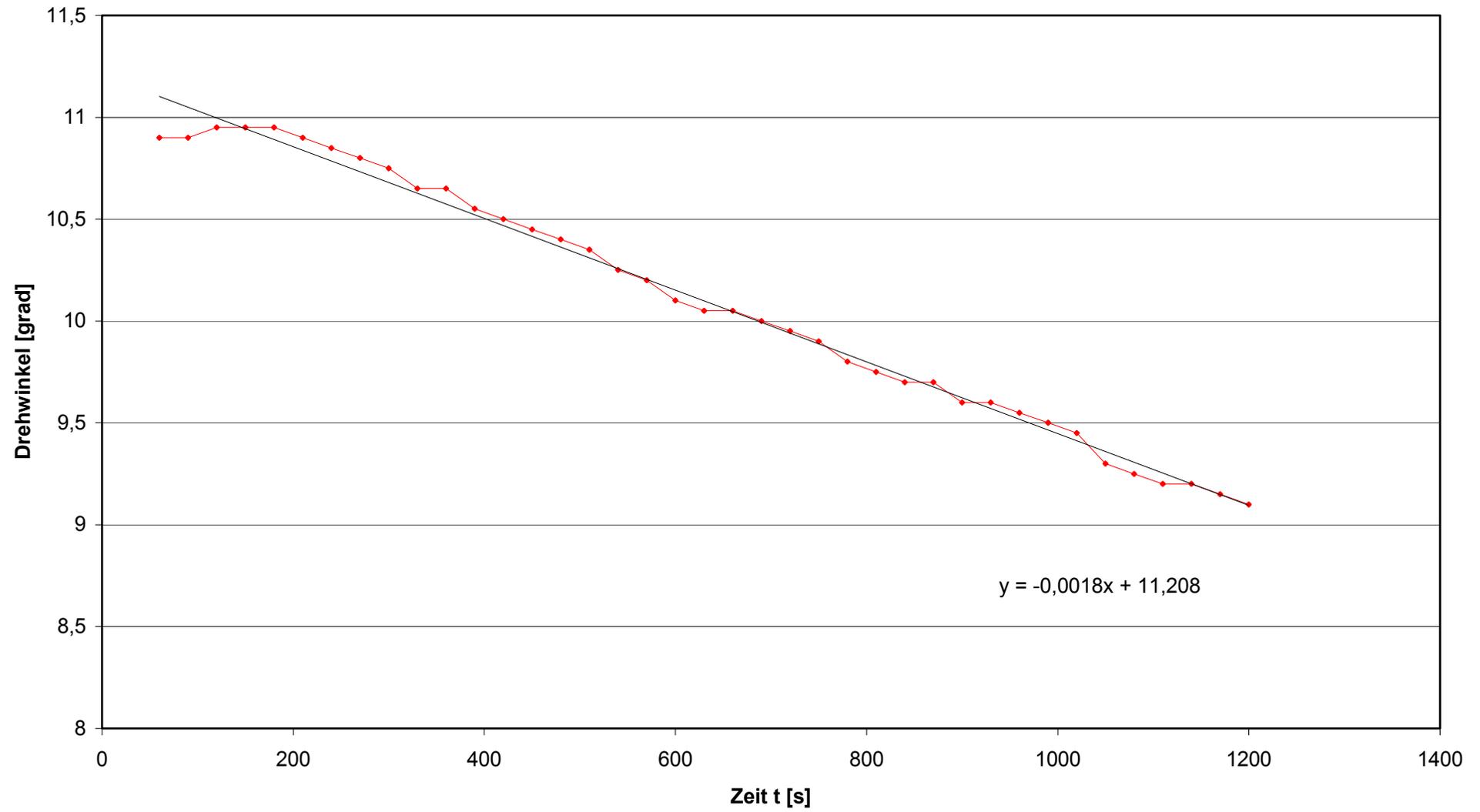
$$\alpha_0(25^\circ\text{C}) = 11,043$$

bei 30°C (303,15 K)

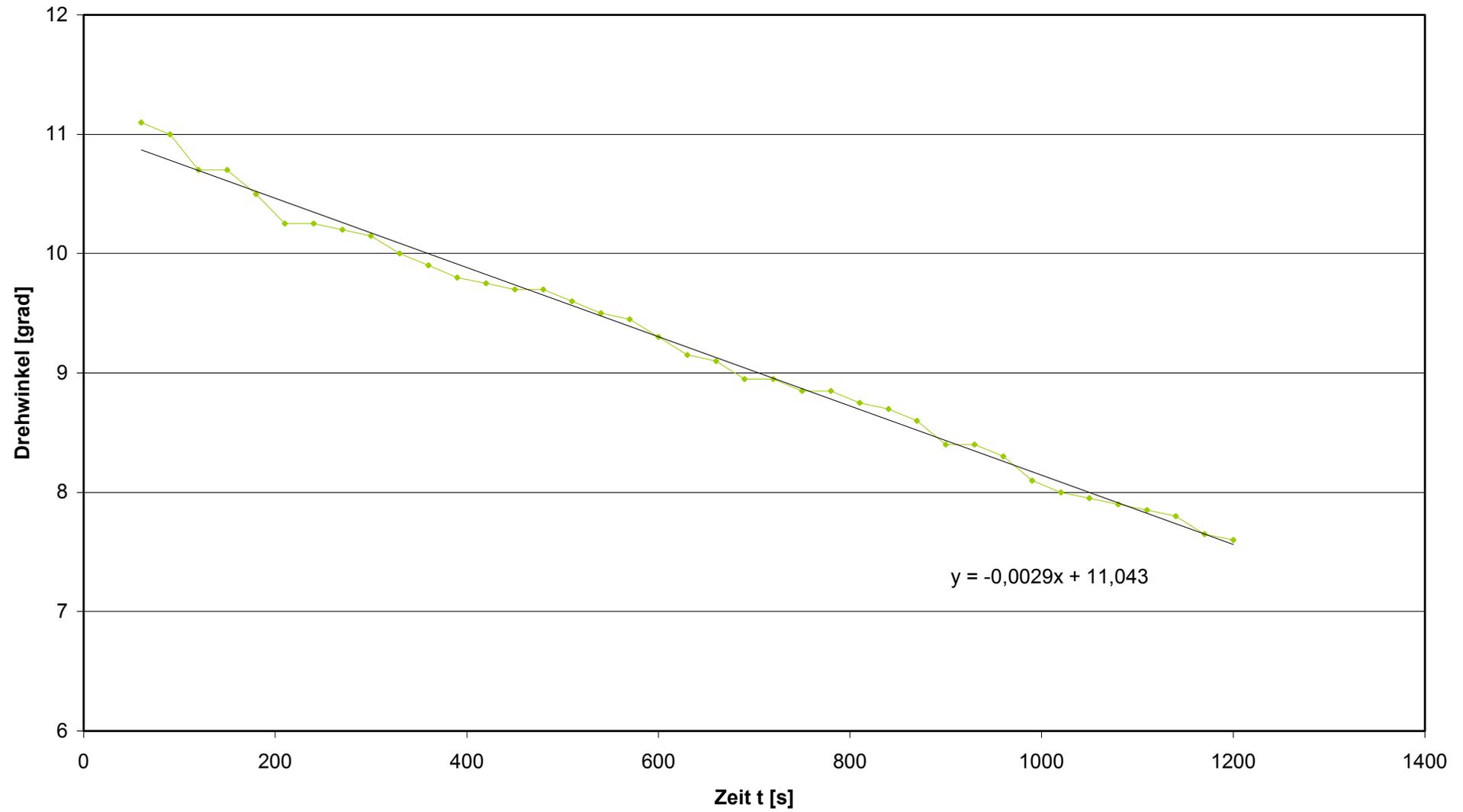
$$\alpha_0(30^\circ\text{C}) = 10,962$$

t [s]	α [Grad]	$\ln\left(\frac{\alpha_0 - \alpha_\infty}{\alpha - \alpha_\infty}\right)$	t [s]	α [Grad]	$\ln\left(\frac{\alpha_0 - \alpha_\infty}{\alpha - \alpha_\infty}\right)$	t [s]	α [Grad]	$\ln\left(\frac{\alpha_0 - \alpha_\infty}{\alpha - \alpha_\infty}\right)$
60	10,90	0,02109089	60	11,10	-0,00389837	60	-	-
90	10,90	0,02109089	90	11,00	0,00295097	90	10,70	0,01821899
120	10,95	0,01763666	120	10,70	0,02378505	120	10,55	0,0288011
150	10,95	0,01763666	150	10,70	0,02378505	150	10,30	0,04669066
180	10,95	0,01763666	180	10,50	0,03791957	180	10,20	0,05393707
210	10,90	0,02109089	210	10,25	0,05587337	210	9,90	0,07599679
240	10,85	0,0245571	240	10,25	0,05587337	240	9,60	0,09855413
270	10,80	0,02803537	270	10,20	0,05950314	270	9,55	0,10236366
300	10,75	0,03152577	300	10,15	0,06314613	300	9,25	0,12553072
330	10,65	0,03854334	330	10,00	0,07415541	330	9,05	0,14127908
360	10,65	0,03854334	360	9,90	0,08156286	360	9,00	0,14525523
390	10,55	0,04561051	390	9,80	0,08902558	390	8,70	0,16944996
420	10,50	0,04916291	420	9,75	0,09277793	420	8,50	0,18591123
450	10,45	0,05272798	450	9,70	0,09654441	450	8,35	0,19843749
480	10,40	0,0563058	480	9,70	0,09654441	480	8,00	0,22829046
510	10,35	0,05989647	510	9,60	0,1041202	510	7,85	0,24136254
540	10,25	0,06711672	540	9,50	0,11175383	540	7,75	0,25017317
570	10,20	0,07074648	570	9,45	0,1155926	570	7,60	0,2635364
600	10,10	0,07804579	600	9,30	0,12719815	600	7,45	0,27708062
630	10,05	0,08171552	630	9,15	0,13893997	630	7,30	0,29081081
660	10,05	0,08171552	660	9,10	0,14288475	660	7,15	0,30473215
690	10,00	0,08539876	690	8,95	0,15481332	690	6,90	0,32837391
720	9,95	0,08909562	720	8,95	0,15481332	720	6,80	0,33798937
750	9,90	0,0928062	750	8,85	0,16284549	750	6,60	0,35750219
780	9,80	0,10026892	780	8,85	0,16284549	780	6,40	0,37740334
810	9,75	0,10402127	810	8,75	0,1709427	810	6,25	0,39259351
840	9,70	0,10778776	840	8,70	0,17501602	840	6,00	0,41843474
870	9,70	0,10778776	870	8,60	0,18321279	870	5,95	0,42368409
900	9,60	0,11536355	900	8,40	0,19981068	900	5,80	0,43959955
930	9,60	0,11536355	930	8,40	0,19981068	930	5,65	0,45577241
960	9,55	0,11917308	960	8,30	0,20821409	960	5,55	0,46670148
990	9,50	0,12299717	990	8,10	0,22523578	990	5,40	0,48332236
1020	9,45	0,12683595	1020	8,00	0,23385652	1020	5,25	0,50022417
1050	9,30	0,1384415	1050	7,95	0,23819493	1050	5,10	0,51741657
1080	9,25	0,14234014	1080	7,90	0,24255223	1080	5,00	0,52904461
1110	9,20	0,14625404	1110	7,85	0,24692861	1110	4,80	0,55271435
1140	9,20	0,14625404	1140	7,80	0,25132422	1140	4,70	0,56476269
1170	9,15	0,15018332	1170	7,65	0,26462818	1170	4,65	0,57084174
1200	9,10	0,15412809	1200	7,60	0,26910246	1200	4,50	0,5893038

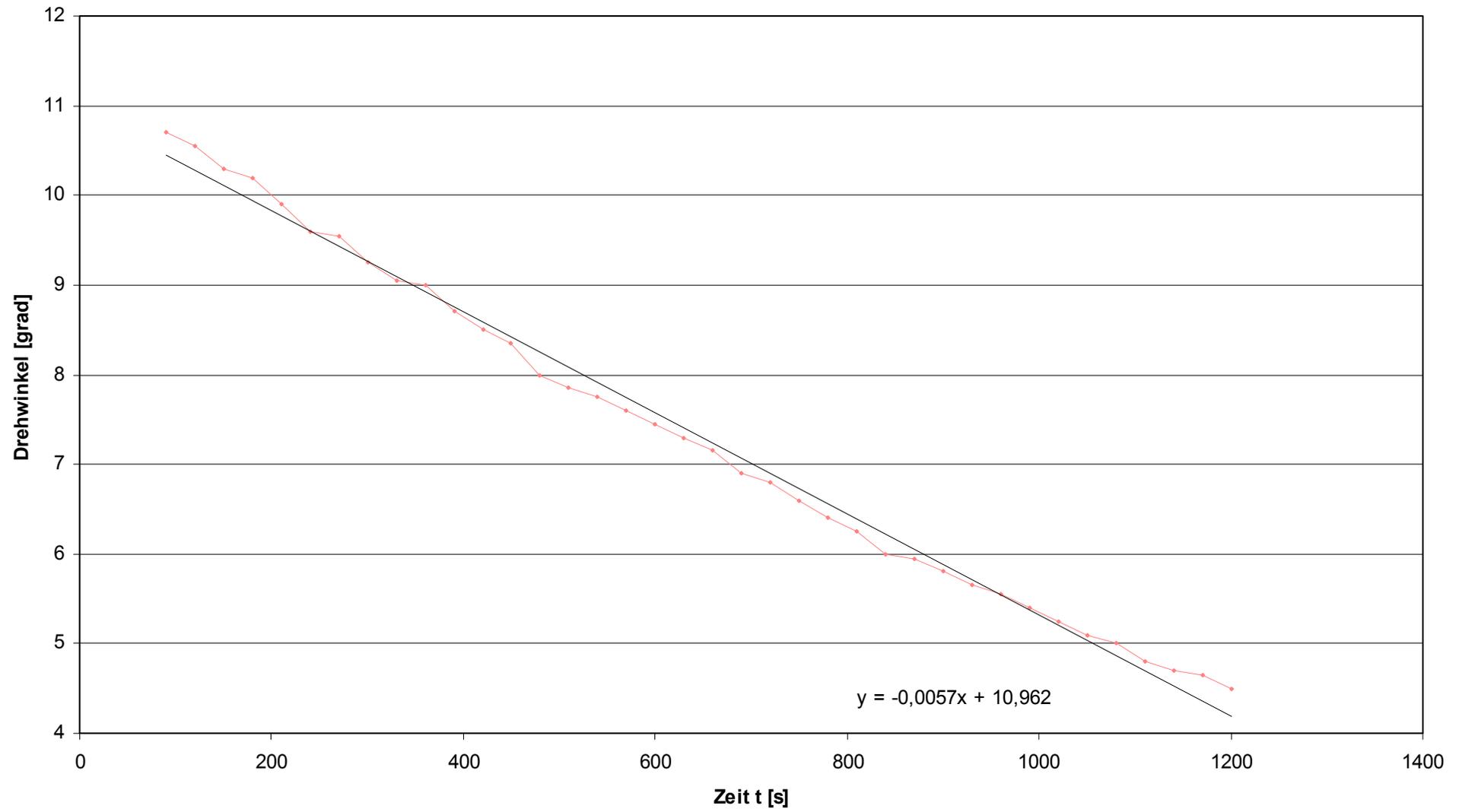
Extrapolation für t=0 bei 20°C



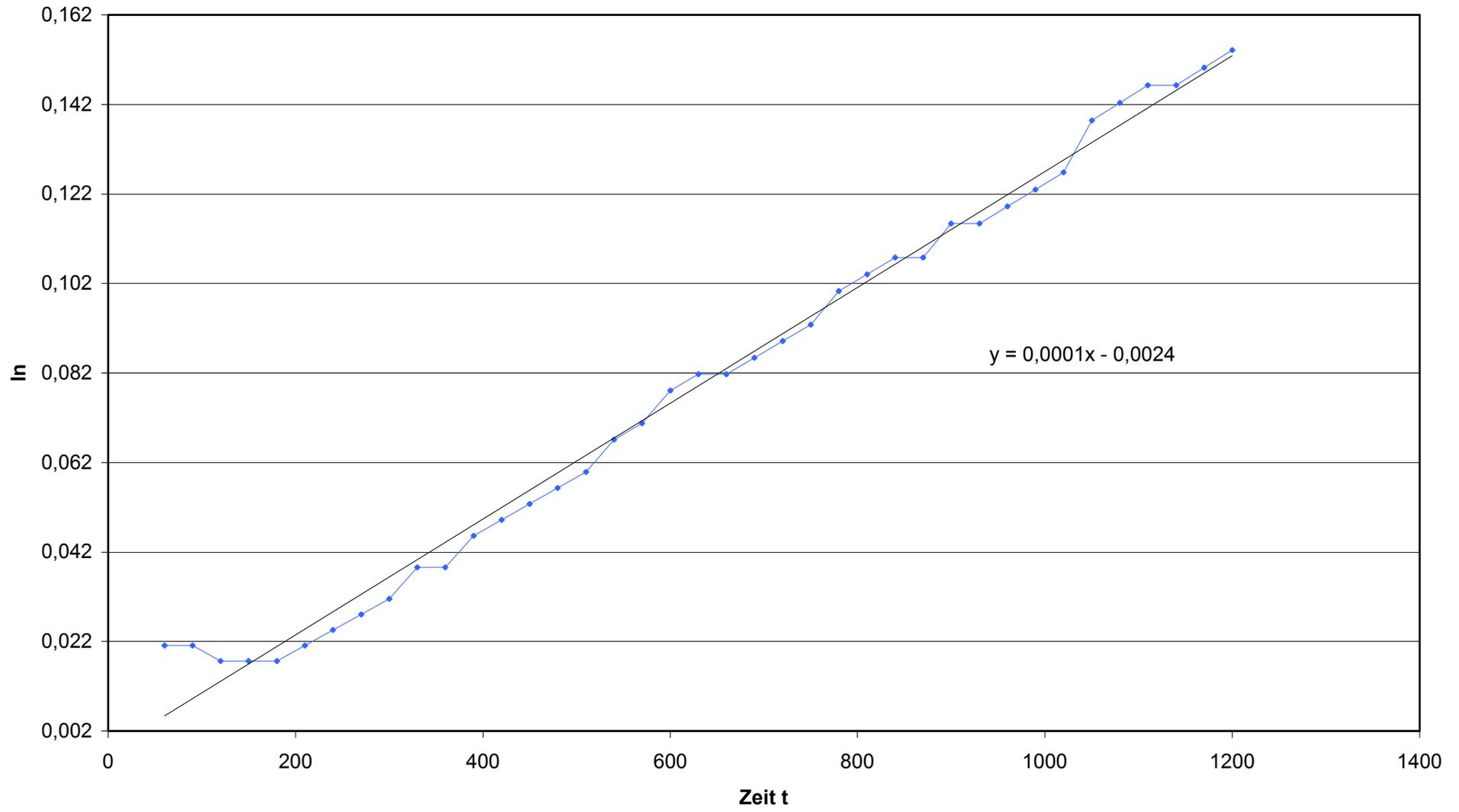
Extrapolation für t=0 bei 25°C



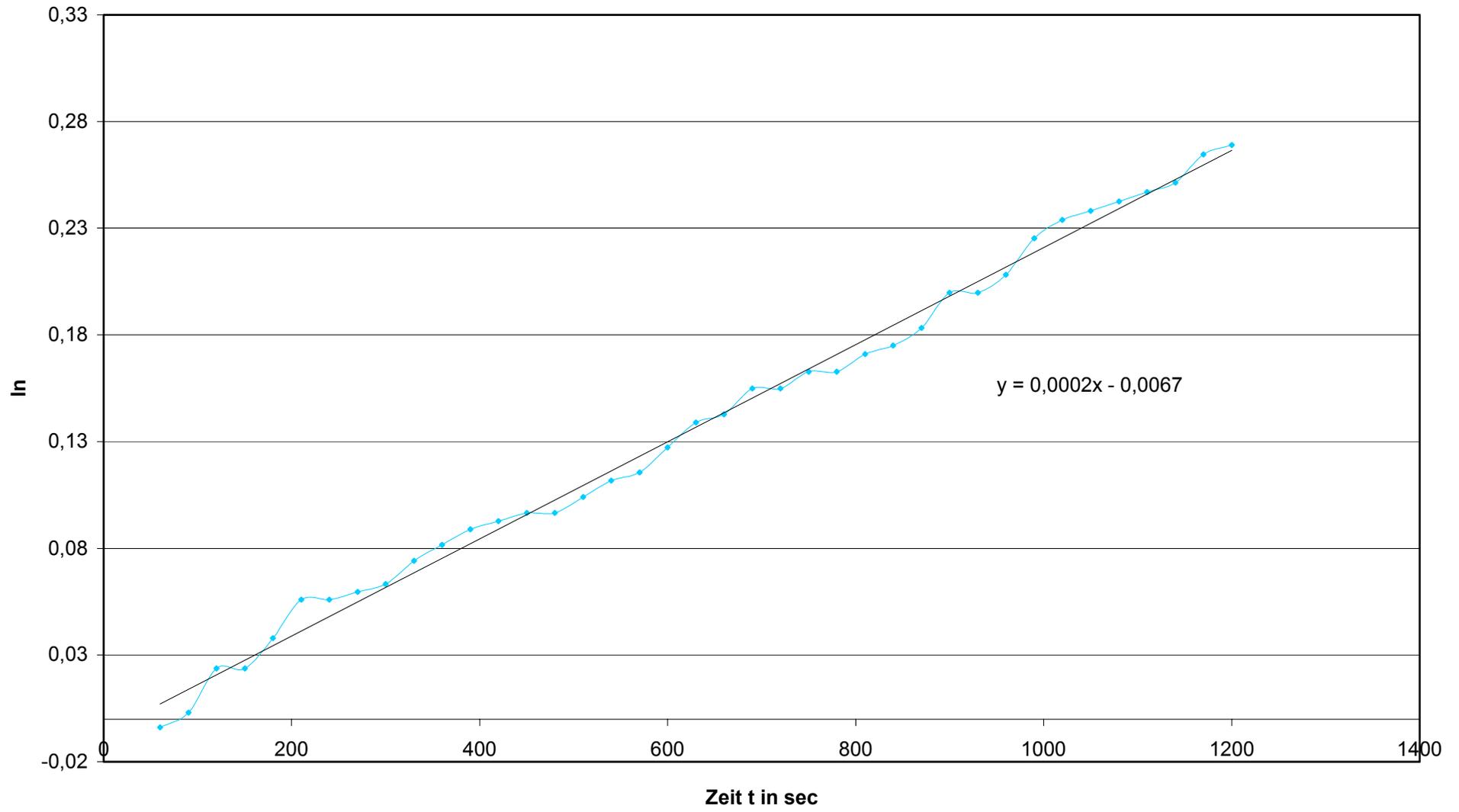
Extrapolation für t=0 bei 30°C



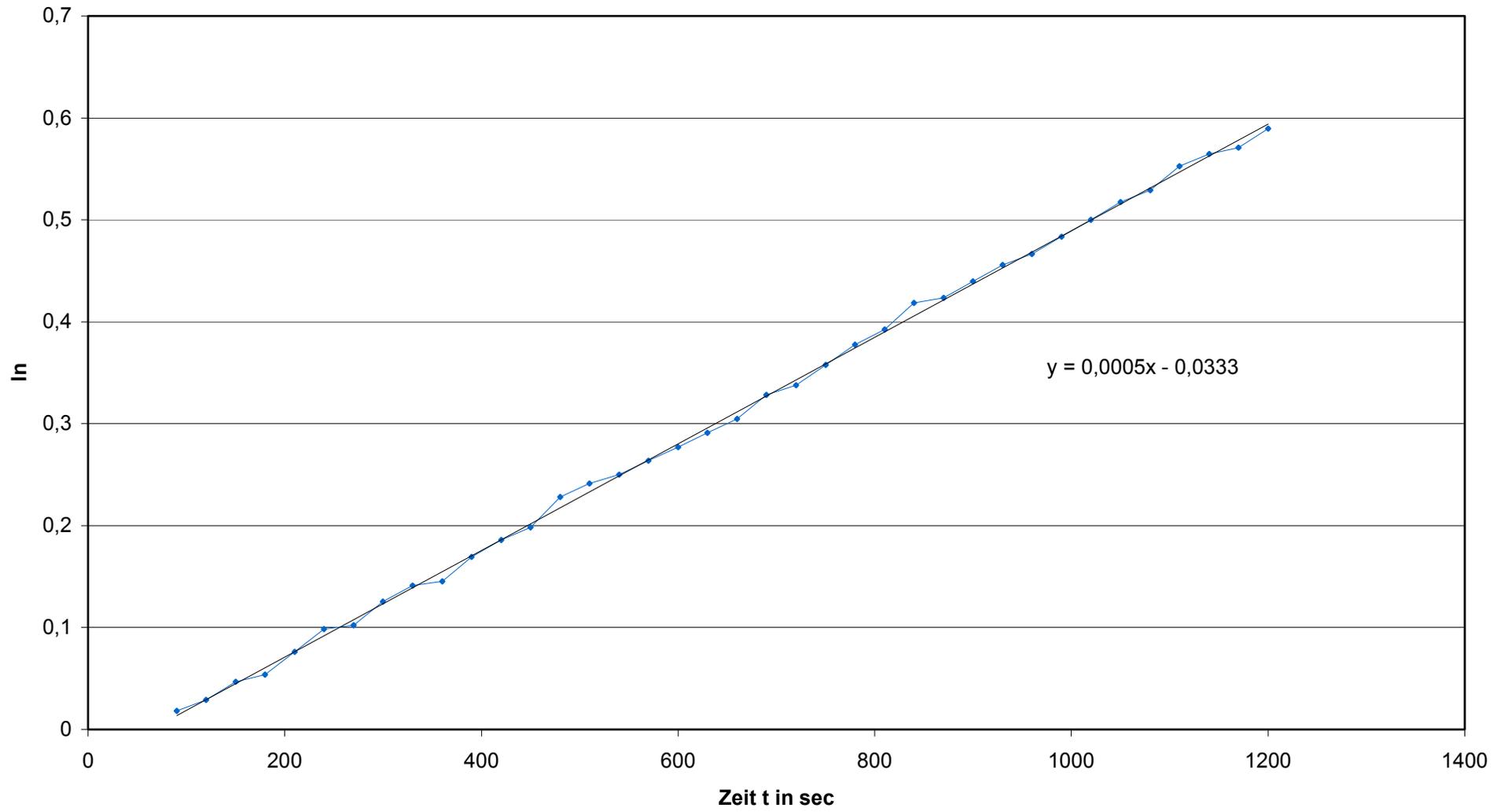
Inversion von Saccharose bei 20°C



Inversion von Saccharose bei 25°C



Inversion von Saccharose bei 30°C



Berechnung der spezifischen Drehung bei 25°C

$$[\alpha]_D^T = \frac{100 \cdot \alpha_0}{c \cdot l}$$

α_0 (= gemessener Drehwinkel) = 11,043°

l (= optische Länge des Polarimeterrohrs) = 2dm

c (= Konzentration [g · 100cm³]) = 10

D → Messung mit der Natrium D-Linie

$$\rightarrow [\alpha]_D^{25^\circ} = \frac{11,043^\circ \cdot 100}{10 \cdot 2} = 55,22^\circ$$

Literaturwert: 66,5°

Der errechnete Wert weicht 11,285° vom theoretischen Wert, dieses entspricht einer prozentualen Abweichung von 16,97.

Bestimmung der Geschwindigkeitskonstanten k

Zur Geschwindigkeitskonstanten-Bestimmung wird $\ln\left(\frac{(\alpha_0 - \alpha_\infty)}{(\alpha - \alpha_\infty)}\right)$ gegen die Zeit t aufgetragen.

20°C

Die Gleichung der Ausgleichsgeraden lautet: $y = 0,0001x - 0,0024$

Die Geschwindigkeitskonstante k entspricht der Steigung dieser Geraden.

$$\Rightarrow k_1 = 0,0001$$

25°C

Die Gleichung der Ausgleichsgeraden lautet: $y = 0,0002x - 0,0067$

$$\Rightarrow k_2 = 0,0002$$

30°C

Die Gleichung der Ausgleichsgeraden lautet: $y = 0,0005x - 0,0333$

$$\Rightarrow k_3 = 0,0005$$

T	20°C	25°C	30°C
k [s ⁻¹]	0,0001	0,0002	0,0005
k [min ⁻¹]	0,006	0,012	0,03

Da k von nur einer Konzentration (c_s) abhängt, wenn man die Konzentration von Wasser konstant ansieht, kann man die Reaktion als eine Reaktion pseudo-erster Ordnung bezeichnen.

Die Reaktion ist ebenfalls erster Ordnung, weil sich sonst bei der verwendeten Auftragung der Daten keine Geraden ergeben hätten. Die Werte liegen sehr gut auf einer Ausgleichslinie.

Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskonstante

Wie bereits im Theorieteil gezeigt:

$$\ln\left(\frac{k}{k_0}\right) = \frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right) \quad E_A = \text{molare Aktivierungsenergie}$$

y = m · x

Es wird $\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)$ gegen $\ln\left(\frac{k}{k_0}\right)$ aufgetragen, wobei die Steigung der Geraden $\frac{E_A}{R}$

$$\frac{E_A}{R} = m \Rightarrow E_A = m \cdot R$$

$$R = 8,314 \cdot J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$$

	k [s⁻¹]	T [K]	$\ln\left(\frac{k}{k_0}\right)$	$\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)$	
1	0,0001	293,15	0,69315	0,0000572	1+2
2	0,0002	298,15	0,91629	0,0000553	2+3
3	0,0005	303,15	1,60944	0,0001125	1+3

Grafische Ermittlung der molaren Aktivierungsenergie

Wir haben grafische folgende Geradengleichung ermittelt: $y = 14193 \cdot x + 0,0084$

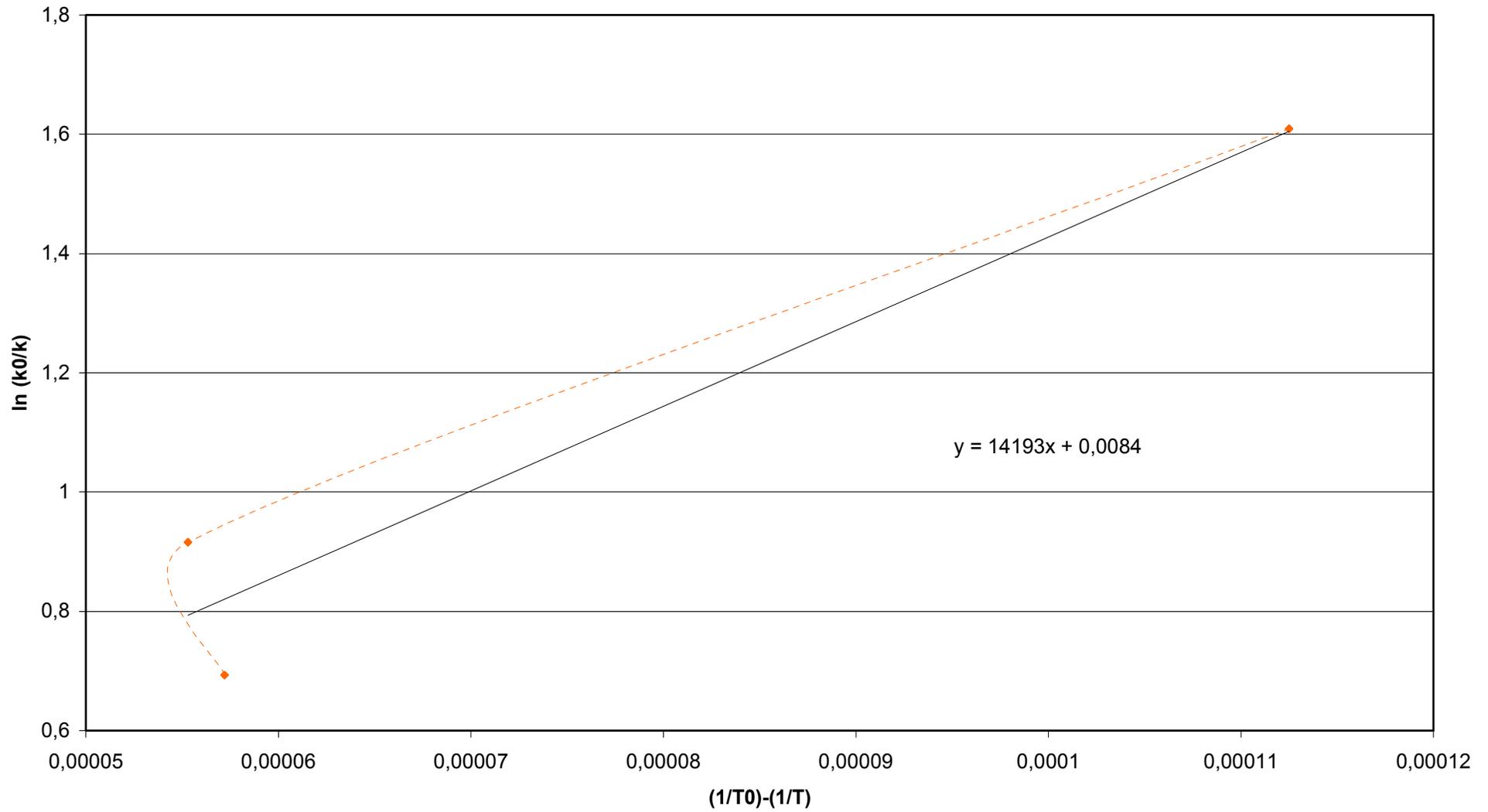
$$\Rightarrow m = 14193K$$

$$E_{A(\text{grafisch})} = m \cdot R$$

$$E_{A(\text{grafisch})} = 14193K \cdot 8,314 \cdot J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$$

$$E_{A(\text{grafisch})} = 118000,6020 \cdot J \cdot mol^{-1} = 118kJ \cdot mol^{-1}$$

Ermittlung der molaren Aktivierungsenergie



Berechnung der molaren Aktivierungsenergie mit den ermittelten Geschwindigkeitskonstanten:

Durch die Messung der Inversion bei zwei verschiedenen Temperaturen kann die Arrhenius-Konstante aus der Gleichung eliminiert werden. Es folgt für die beiden Geschwindigkeitskonstanten:

$$k_1 = A \cdot e^{-\frac{E_A}{RT_1}} \quad \Rightarrow \quad \ln k_1 = \ln A - \frac{E_A}{RT_1} \quad (\text{I})$$

$$k_3 = A \cdot e^{-\frac{E_A}{RT_3}} \quad \Rightarrow \quad \ln k_3 = \ln A - \frac{E_A}{RT_3} \quad (\text{II})$$

$$(I) - (II): \quad \ln k_1 - \ln k_3 = -\frac{E_A}{RT_1} + \frac{E_A}{RT_3}$$

$$R \cdot \ln \frac{k_1}{k_3} = E_A \cdot \left(\frac{1}{T_3} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$E_A = \frac{R \cdot \ln \frac{k_1}{k_3}}{\frac{1}{T_3} - \frac{1}{T_1}}$$

$$k_1 = 0,0001 \quad T_1 = 293,15 \text{ K}$$

$$k_3 = 0,0005 \quad T_3 = 303,15 \text{ K}$$

$$E_{A(\text{errechnet})} = \frac{8,314 \cdot J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1} \cdot \ln \frac{0,0001}{0,0005}}{\frac{1}{303,15K} - \frac{1}{293,15K}} = 118913,6525 \cdot J \cdot mol^{-1} = \underline{\underline{118,91kJ \cdot mol^{-1}}}$$

Die errechnete molare Aktivierungsenergie deckt sich in etwa mit der grafisch ermittelten.

Zeit für 50%-igen Saccharose-Umsatz

$$E_A = 118.913,65 \cdot J \cdot mol^{-1}$$

$$A = 7,63 \cdot 10^{12}$$

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_A}{RT}}$$

$$t_{1/2} = \ln \frac{2}{k}$$

0°C

$$T = 273,15K$$

$$k = 2,14 \cdot 10^{-7} s^{-1} = 0,00001284 \text{ min}^{-1}$$

$$t_{1/2} = \underline{\underline{11,956 \text{ min}}}$$

25°C

$$T = 298,15 K$$

$$k = 0,0002 s^{-1} = 0,012 \text{ min}^{-1}$$

$$\underline{\underline{t_{1/2} = 5,12 \text{ min}}}$$

50°C

$$T = 323,15 K$$

$$k = 0,00023 s^{-1} = 0,0136 \text{ min}^{-1}$$

$$\underline{\underline{t_{1/2} = 4,991 \text{ min}}}$$

100°C

$$T = 373,15 K$$

$$k = 0,0372 s^{-1} = 2,232 \text{ min}^{-1}$$

$$\underline{\underline{t_{1/2} = 3,98 s}}$$

6. Fehlerbetrachtung

Am gravierendsten sind die Ablesefehler des Polarimeters zu bewerten. Bereits geringe, nicht mehr wahrnehmbare Helligkeitsunterschiede können die Messwerte verfälschen. Das fällt besonders deswegen ins Gewicht, weil der Messwert sowohl nach oben als auch nach unten abweichen kann und somit statistischer Natur ist. Aufgrund der etwas umständlichen Befüllung des Polarimeterrohrs konnte nicht sofort nach Mischung der Lösung deren Drehwinkel gemessen werden, so dass α_0 bereits fehlerbehaftet in die Rechnung eingeht.

Die Zeit konnte zwar nicht allzu genau eingehalten werden, jedoch kann diese Ungenauigkeit aufgrund der doch recht langsamen Reaktion besonders im Vergleich zum erstgenannten Problem vernachlässigt werden.

Die Aktivierungsenergie wird in der Literatur mit $91,3 kJ \cdot mol^{-1}$ angegeben. Der ermittelte Wert von $118 kJ \cdot mol^{-1}$ weicht vom Idealwert um ca. 29,24 % ab.