Thermodynamik

Jede chemische Reaktion ist eine Gleichgewichtsreaktion: $\boxed{aA + bB \rightleftharpoons cC + dD}$

Wenn eine Reaktion im *dynamischen Gleichgewicht* vorliegt, d.h. die Geschwindigkeiten der Hin- und Rückreaktionen gleich sind, findet keine Änderung der freien Enthalpie statt und es gilt dann:

$$\boxed{\Delta G^{\circ} = 0}$$

Die Gleichgewichtsreaktion mit den Gleichgewichtskonzentrationen [A], [B], [C] und [D] wird durch eine Gleichgewichtskonstante K beschrieben und es gilt:

$$\boxed{K = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}}$$

Entsprechend der Thermodynamik gelten die Gleichungen:

$$\boxed{\Delta G^{\circ} = \Delta H^{\circ} - T\,\Delta S^{\circ}}$$

Gibbs-Helmholtz-Gleichung

$$\boxed{\Delta G^{\circ} = -RT\ln K}$$

Van´t Hoff´sche Regel

Und damit:

$$0 = \Delta G^{\circ} + R \cdot T \cdot ln \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

Da die Gibbs-Helmholzt-Gleichung und die Van`t Hoff´sche Regel beide ΔG° beschreiben, gilt:

$$\Delta H^{\circ} - T\Delta S^{\circ} = -RTlnK$$

Gleichung auflösen nach lnK (und Minuszeichen nach rechts „bringen“) ergibt:

$$lnK = -\frac{\Delta H^{\circ}}{RT} + \frac{T\Delta S^{\circ}}{RT}$$

Ableiten bzw. Differenzieren (mathematisch) nach der Temperatur T, da die Gleichung temperaturabhängig ist, d.h. der Gleichgewichtszustand und damit die Gleichgewichts-konstante K ändert sich bei Änderung der Temperatur:

$$\frac{\partial lnK}{\partial T} = +\frac{\Delta H^{\circ}}{RT^2}$$

Herleitung:

$$lnK = -\frac{\Delta H^{\circ}}{RT} + \frac{\cancel{T}\Delta S^{\circ}}{R\cancel{T}}$$

1. T kürzen, somit ist kein T mehr vorhanden und gilt als Konstante in einer mathematischen Funktion.

2. T ist als variable x zu betrachten.

3. Ableitungsregeln in einer mathematischen Formelsammlung heraussuchen und anwenden.
Da die Ableitung einer Konstanten 0 ist, fällt der zweite Term weg.

Da T als x betrachtet wird, lautet die Ableitung (in Formelsammlung nachsehen):

$$\frac{1}{x} \rightarrow -\frac{1}{x^2}$$

Unter Beachtung der Vorzeichen ergibt sich dann wie schon oben steht:

$$\boxed{\frac{\partial lnK}{\partial T} = +\frac{\Delta H^{\circ}}{RT^2}}$$

Umstellen der Gleichung führt zu:

$$\boxed{dlnK = \frac{\Delta H^{\circ}}{R}\frac{1}{T^2}dT}$$

Integrieren (Regeln ebenfalls in Formelsammlung nachschauen, hier entspricht T dem x und K dem y) führt zu:

$$\boxed{\int_{K_1}^{K_2} d\ln K = \frac{\Delta H^\circ}{R} \int_{T_1}^{T_2} \frac{1}{T^2}\, dT}$$

1. Hier entspricht $1/T^2$ dem $1/x^2$.

2. $1/x^2$ ist x^{-2}

3. Anwenden der Integrationsregeln:

$$\int x^n dx = \frac{1}{n+1} x^{n+1} \rightarrow \text{mit } n^{-2} \rightarrow \frac{1}{-2+1} x^{-2+1} \rightarrow -1\, x^{-1} = -1\frac{1}{x} \rightarrow -\frac{1}{T}$$

Daraus folgt (unter Beachtung der Vorzeichen):

$$\boxed{\ln K_2 - \ln K_1 = \frac{\Delta H^\circ}{R}\left[-\frac{1}{T_2} + \frac{1}{T_1}\right]}$$

Umstellen der Gleichung (Regeln fürs Rechnen mit Logarithmen beachten)

$$\boxed{\ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{\Delta H^\circ}{R}\left[\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right]}$$

$y = f(x)$	$y' = f'(x)$
$c = const$	0
x^n	$n \cdot x^{n-1}$
$\sqrt{x}$	$\frac{1}{2 \cdot \sqrt{x}}$
$sin(x)$	$cosx$
$cos(x)$	$-\ sinx$
$tan(x)$	$\frac{1}{cos^2 x}$
$cot(x)$	$\frac{-1}{sin^2 x}$
$arcsin(x)$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
$arccos(x)$	$\frac{-1}{\sqrt{1-x^2}}$
$arctan(x)$	$\frac{1}{1+x^2}$
$arccot(x)$	$\frac{-1}{1+x^2}$
e^x	e^x
a^x	$lna \cdot a^x$
lnx	$\frac{1}{x}$
$log_a x$	$\frac{1}{lna \cdot x}$

$f(x)$	$f'(x)$
$c = const$	0
x	1
$a \cdot x$	a
x^n	$n \cdot x^{n-1}$
ax^n	anx^{n-1}
ax^2	$2ax$
$\frac{1}{x}$	$-\frac{1}{x^2}$
$\sqrt{x}$	$\frac{1}{2\sqrt{x}}$
e^x	e^x
a^x	$lna \cdot a^x$

https://www.google.com/search?q=Formelsammlung+ableitungen&client=firefox-b&tbm=isch&tbo=u&source=univ&sa=X&ved=2ahUKEwja9rrygaTeAhWSqaQKHW7XCHwQ7Al6BAgFEBE&biw=1280&bih=869#imgrc=U3JXup9sJZi_PM:

Tabelle der Grundintegrale

Die in dieser Tabelle aufgeführten Grundintegrale (aus Platzgründen wurde dabei die Integrationskonstante weggelassen) sind in der Klausur *ohne weitere Herleitung* verwendbar.

Alle anderen in der Klausur auftretenden Integrale sind mit geeigneten Umformungen oder Integrationsmethoden herzuleiten.

$\int a\,dx = ax$	$\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \begin{cases} \arcsin x \\ -\arccos x \end{cases}, \quad \lvert x\rvert < 1$
$\int x^n\,dx = \frac{x^{n+1}}{n+1}, \quad n \neq -1$	$\int \frac{dx}{1+x^2} = \begin{cases} \arctan x \\ -\operatorname{arccot} x \end{cases}$
$\int e^x\,dx = e^x$	$\int \sinh x\,dx = \cosh x$
$\int a^x\,dx = \frac{a^x}{\ln a}, \quad a > 0, a \neq 1$	$\int \cosh x\,dx = \sinh x$
$\int \frac{1}{x}\,dx = \ln\lvert x\rvert, \quad x \neq 0$	$\int \frac{dx}{\cosh^2 x} = \tanh x$
$\int \cos x\,dx = \sin x$	$\int \frac{dx}{\sinh^2 x} = -\coth x, \quad x \neq 0$
$\int \sin x\,dx = -\cos x$	$\int \frac{dx}{\sqrt{1+x^2}} = \operatorname{arsinh} x$
$\int \frac{dx}{\cos^2 x} = \tan x, \quad x \neq \frac{(2k+1)\pi}{2}$	$\int \frac{dx}{\sqrt{x^2-1}} = \begin{cases} \operatorname{arcosh} x, & x > 1 \\ -\operatorname{arcosh}(-x), & x < -1 \end{cases}$
$\int \frac{dx}{\sin^2 x} = -\cot x, \quad x \neq k\pi$	$\int \frac{dx}{1-x^2} = \begin{cases} \operatorname{artanh} x, & \lvert x\rvert < 1 \\ \operatorname{arcoth} x, & \lvert x\rvert > 1 \end{cases}$

Integrationsformeln, die ohne Herleitung verwendet werden dürfen:

$$\int f(ax+b)\,dx = \frac{1}{a}F(ax+b) + C \quad \text{mit } F'(x) = f(x) \quad \text{(lineare Substitution)}$$

$$\int \frac{f'(x)}{f(x)}\,dx = \ln\lvert f(x)\rvert + C$$

$$\int f(x)\cdot f'(x)\,dx = \frac{1}{2}[f(x)]^2 + C$$

$$\int f'(x)\cdot g(x)\,dx = f(x)\cdot g(x) - \int f(x)\cdot g'(x)\,dx \quad \text{(partielle Integration)}$$

$$\int \frac{Ax+B}{x^2+px+q}\,dx = \frac{A}{2}\ln\lvert x^2+px+q\rvert + \frac{2B-Ap}{\sqrt{4q-p^2}}\arctan\left(\frac{2x+p}{\sqrt{4q-p^2}}\right) + C$$

mit $p^2 - 4q < 0$

$\int \frac{Ax+B}{(x^2+px+q)^m}\,dx$ kann auf ein Integral $\int \frac{Ax+B}{(x^2+px+q)^{m-1}}\,dx$ zurückgeführt werden, siehe Formelsammlungen

http://www.mathe.tu-freiberg.de/files/personal/111/grundintegrale.pdf#page=1&zoom=auto,-22,497