

Energieänderungen, Geschwindigkeiten und Gleichgewichte von Reaktionen (Beispiel Aktivität)

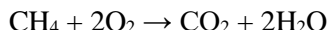
Bei dieser Aktivität geht es um verschiedene Arten von chemischen Reaktionen und die thermodynamischen Veränderungen, die beim Erreichen des Gleichgewichts auftreten.

Vorbereitung:

Simulation A zeigt Ihnen die Veränderungen der potenziellen Energie (in der Praxis die Energie des höchsten besetzten Molekülorbitals) eines Wasserstoffmoleküls, wenn sich die beiden Wasserstoffatome einander nähern.

- Nutzen Sie die Informationen aus der Simulation und/oder Ihr Wissen über das Coulombsche Gesetz, um die Form des Graphen der potenziellen Energie qualitativ zu erklären.
- Die potenzielle Energie im Gleichgewichtsabstand der Bindung (74,1 pm) unterscheidet sich von derjenigen, wenn die Atome vollständig getrennt sind. Erläutern Sie, inwiefern dies nicht gegen das Gesetz der Energieerhaltung verstößt.
- Definieren Sie die Begriffe "endotherm" und "exotherm".
- Ist die Bildung einer kovalenten Bindung endotherm oder exotherm? Wie steht es mit dem Brechen einer kovalenten Bindung? Erläutern Sie Ihre Antwort.
- Definieren Sie den Begriff "Bindungsenthalpie".
- Die Bindungsenthalpie der H-H-Bindung beträgt 436 kJ/mol. Die Bindungsenthalpie der F-F-Bindung, die eine Länge von 141,2 pm hat, beträgt 155 kJ/mol. Diskutieren Sie mit Ihren Nachbarn, wie das Diagramm der potenziellen Energie im Vergleich zum Abstand für das F-F-Molekül aussehen könnte. Verwenden Sie anschließend Simulation A, um das Diagramm zu erstellen und Ihre Vorhersage zu überprüfen.

- Im oberen Bereich der Simulation B können Sie nach Belieben Bindungen zwischen einem vordefinierten Satz von Kohlenstoff-, Wasserstoff- und Sauerstoffmolekülen aufbrechen und bilden. Sie können davon ausgehen, dass jedes Atom in der Simulation 1 mol gasförmiger Atome darstellt. Sie können auch den physikalischen Zustand bestimmter Moleküle ändern, wenn die Software dies zulässt. Das Diagramm im unteren Bereich zeigt die Enthalpieänderungen bei jedem Bindungsbruch oder -aufbau. Ihr erstes Ziel ist es, die Enthalpie der folgenden Reaktion über verschiedene Wege zu bestimmen:



Versuchen Sie unter Verwendung von Simulation B drei verschiedene Reaktionswege (die die unten genannten Bedingungen erfüllen), bei denen die oben genannten Produkte entstehen könnten. Schreiben Sie für jeden Weg das Reaktionsgleichgewicht und die Enthalpieänderung für *jeden Teilschritt auf* und stellen Sie sicher, dass am Ende jedes Schritts nur "lebensfähige" Moleküle vorhanden sind (d. h. Wasserstoff hat eine Bindung, Kohlenstoffe haben vier Bindungen und Sauerstoff hat zwei Bindungen).

- Beispiel: enthält $\text{CH}_2(\text{OH})_2$ als Zwischenprodukt:

Schritt 1: $\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2(\text{OH})_2$, $\Delta H = -321 \text{ kJ/mol}$ Schritt 2: $\text{CH}_2(\text{OH})_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$, $\Delta H = -487 \text{ kJ/mol}$
--

- Weg 1: sollte C, H_2 und O_2 als einzige Zwischenprodukte enthalten.

- iii. Weg 2: sollte Ameisensäure (HCOOH) als Zwischenprodukt enthalten

- iv. Reaktionsweg 3: sollte Methanol (CH₃ OH) als Zwischenprodukt enthalten.
Hinweis: Sie sollten die Reaktion mit zwei CH₄ Molekülen beginnen, um zu vermeiden, dass es ungebundene Atome in der Zwischenstufe gibt!

- a. Wie hoch ist die gesamte Enthalpieänderung für die Reaktion über jeden Weg? Entspricht sie Ihren Erwartungen? Erläutern Sie.
- b. Die experimentelle Verbrennungsenthalpie von Methangas beträgt -891 kJ/mol und unterscheidet sich damit von dem Wert, den Sie bei der Durchführung der Reaktion aus Simulation B erhalten. Erklären Sie die Ursache für diese Diskrepanz und achten Sie dabei besonders auf die Spezies, die bei der Verbrennung von Methan entstehen.
- c. Definieren Sie den Begriff Standardbildungsenthalpie, ΔH_f° .
- d. Schreiben Sie die Gleichung für die Standardbildung von Methangas auf und verwenden Sie Simulation B und/oder andere bereitgestellte Informationen, um ihr ΔH_f° zu ermitteln.
- e. Schreiben Sie die Gleichung für die Standardbildung von Ameisensäuregas auf und verwenden Sie Simulation B und/oder andere bereitgestellte Informationen, um ihr ΔH_f° zu ermitteln.
- f. Verwenden Sie Simulation B, um die Enthalpie der folgenden Reaktion zu bestimmen:
 $\text{CH}_4(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{HCOOH}(\text{g}) + \text{H}_2(\text{g})$.
- g. Wie hängt die Enthalpieänderung in f mit den Bildungsenthalpien in d und e zusammen? Wie spielen die Bildungsenthalpien von O_{2(g)} und H_{2(g)} eine Rolle?
2. Was ist Entropie? Bestimmen Sie für die folgenden Prozesse, ob sie zu einer Zunahme oder einer Abnahme der Entropie führen, und erklären Sie, warum.
- a. $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{g})$
- b. $\text{NaCl}(\text{s}) \rightarrow \text{Na}^+(\text{aq}) + \text{Cl}^-(\text{aq})$
- c. $\text{C}_{10}\text{H}_8(\text{s}) \rightarrow \text{C}_{10}\text{H}_8(\text{g})$
- d. $3\text{H}_2(\text{g}) + 2\text{N}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NH}_3(\text{g})$
- e. $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g}) \rightarrow 2\text{NO}_2(\text{g})$

Bonusfrage: Betrachten Sie die Reaktion 3e, die in einem einzigen Gasbehälter durchgeführt wird. Welche Auswirkung hat die Verringerung des Volumens des Gasbehälters auf die Produktion von NO_{2(g)}? Erläutern Sie Ihre Antwort.

3. Ein Kollege von Ihnen macht folgende Aussage: "Exotherme Reaktionen laufen bei niedrigen Temperaturen spontan ab."

- a. Was ist der Unterschied zwischen der Unterscheidung von exotherm/endothrm und spontan/nicht spontan?
 - b. Geben Sie die Gleichung zur Bestimmung der Spontaneität einer Reaktion an.
 - c. Benutze deine Gleichung, um die Aussage deines Kollegen zu bewerten.
 - d. Wie hängt die Spontaneität der Reaktion, wenn überhaupt, mit der Geschwindigkeit zusammen, mit der die Reaktion abläuft?
4. Betrachten Sie die folgende allgemeine Reaktion zwischen wässriger Schwefelsäure und Ammoniak:
- $$\text{H}_2\text{SO}_{4(\text{aq})} + 2\text{NH}_{3(\text{aq})} \rightarrow \text{SO}_4^{2-}(\text{aq}) + 2\text{NH}_4^+(\text{aq})$$

- a. Schreiben Sie alle verschiedenen Möglichkeiten auf, wie die Reaktionsgeschwindigkeit ausgedrückt werden kann. Die erste Art ist als Beispiel angegeben.

Reaktionsgeschwindigkeit = $-\frac{d[\text{H}_2\text{SO}_4]}{dt}$ = = =

5. Wie lauten die Einheiten der Reaktionsgeschwindigkeit? _____
6. Die Kollisionstheorie besagt, dass die Geschwindigkeit einer Reaktion proportional zur Anzahl der erfolgreichen Kollisionen zwischen den Reaktionsteilnehmern ist.
 - a. Wie nennt man die Energieschwelle, die überwunden werden muss, damit eine Kollision eine Reaktion "erfolgreich" auslöst?
 - b. Erläutern Sie anhand von Simulation C, wie sich (i) eine Temperaturerhöhung oder (ii) die Zugabe eines Katalysators auf die Reaktionsgeschwindigkeit auswirkt, und zwar anhand des Molekularverhaltens.
 - c. Die Auswirkungen der Temperatur und der Zugabe eines Katalysators sind in der Arrhenius-Gleichung zusammengefasst (siehe "*Hilfreiche Informationen*"). Schreiben Sie die Gleichung auf und überprüfen Sie, ob die von Ihnen in Teil b beschriebenen Effekte auch mathematisch sinnvoll sind!
7. In Simulation D können Sie den Verlauf von zwei Reaktionen beobachten und die Anzahl der erfolgreichen Zusammenstöße zwischen den Molekülen zählen. Die erste Reaktion ist:
$$\text{H}_2\text{S} + \text{CN}^- \rightleftharpoons \text{HS}^- + \text{HCN}$$
 - a. Drücken Sie die Geschwindigkeit der Vorwärtsreaktion in Abhängigkeit von den Konzentrationen der Reaktanten aus.
 - b. Wiederholen Sie den Vorgang für die Geschwindigkeit der umgekehrten Reaktion.
 - c. Ist es möglich, alle Moleküle H_2S in HS^- umzuwandeln? Warum oder warum nicht?
 - d. Was passiert mit den Konzentrationen der Reaktanten und Produkte nach XX Zeit? Was geschieht mit der Vorwärts- und Rückwärtsgeschwindigkeit der Reaktionen nach dieser Zeit?
 - e. Geben Sie die Gleichgewichtskonstante K für diese Reaktion an.
 - f. Verwenden Sie die Informationen aus der Simulation, um den Wert von K zu berechnen.
8. Wechseln Sie zur Reaktion 2 bei Simulation D:
$$\text{AgCl}_{(\text{s})} \rightarrow \text{Ag}^+_{(\text{aq})} + \text{Cl}^-_{(\text{aq})}$$
 - a. Die Gleichgewichtskonstante für diese Reaktion ist $K = [\text{Ag}^+][\text{Cl}^-]$. Wie lautet eine alternative Bezeichnung für diese Gleichgewichtskonstante?

- b. Fügen Sie der Lösung in Simulation D zunehmende Mengen an festem AgCl hinzu und notieren Sie das Produkt $Q = [\text{Ag}^+][\text{Cl}^-]$ für jedes zugegebene μmol AgCl. An welchem Punkt stellt sich ein Gleichgewicht für die obige Reaktion ein? Woher wissen Sie das?
 - c. Verwenden Sie die Informationen aus der Simulation, um den Wert von K für diese Reaktion zu bestimmen.
 - d. Berechnen Sie die Löslichkeit von $\text{AgCl}_{(\text{s})}$ in mg/L bei Raumtemperatur.
 - e. Stellen Sie die Simulation D mit ca. $5.0 \mu\text{mol}$ AgCl ein. Geben Sie $25 \mu\text{mol}$ Silbernitrat (AgNO_3) in die Lösung und fügen Sie dann nach und nach $\text{AgCl}_{(\text{s})}$ in Schritten von $1 \mu\text{mol}$ hinzu, bis die Lösung gesättigt ist. Wie unterscheidet sich der Wert von K in dieser Situation?
 - f. Wie wird die Löslichkeit von $\text{AgCl}_{(\text{s})}$ durch das bereits in Lösung befindliche Ag-Ion⁺ beeinflusst?
9. Warum haben wir bei den Gleichgewichtskonstanten der vorherigen Fragen nicht die "Konzentrationen" von Wasser und Feststoffen berücksichtigt?
10. Das Löslichkeitsprodukt von Ag_2CrO_4 ist $L = 10^{-12} \text{ mol}^3 \text{ L}^{-3}$. Bestimmen Sie mit Hilfe Ihrer Kenntnisse der Gleichgewichtskonstanten die maximale Masse von Ag_2CrO_4 , die in dieser Lösung gelöst werden kann:
 - a. 1,0 l Wasser
 - b. 1,0 L einer 0.050 mol L^{-1} Lösung von K_2CrO_4 in Wasser
11. *Bonusfrage:* Betrachten Sie die Werte der Gleichgewichtskonstanten für die Reaktionen in Frage 6 und 7. Was lässt sich über die Spontaneität der beiden Reaktionen sagen?