

Energieänderungen, Geschwindigkeiten und Gleichgewichte von Reaktionen

QR Code

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

Link zu den Simulationen für diese Aktivität: <https://tcel-hu-berlin.github.io/silc/thermo+kinetik/>

💡 = Hinweis auf der Website verfügbar

💬 = Diskussionspunkt

Vorbereitungsaufgaben

(vor der Übung zu bearbeiten)

1. Wie Sie bereits gelernt haben, können sich Energieniveaus zweier Atome, welche nahe beieinander liegen, mischen und Molekülorbitale bilden. Simulation A zeigt Ihnen die Veränderungen der potenziellen Energie (tatsächlich, die Energie des am höchsten besetzten Molekülorbitals) eines Wasserstoffmoleküls, wenn sich zwei Wasserstoffatome einander nähern. Betrachten Sie das Diagramm der potenziellen Energie in Abhängigkeit vom Abstand.
 - a) Nutzen Sie die Informationen aus der Simulation und Ihr Wissen über das coulombsche Gesetz, um die Form des Graphen der potenziellen Energie qualitativ zu erklären.
 - b) 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.
 - c) Definieren Sie die Begriffe "endotherm" und "exotherm".
 - d) Ist die Bildung einer kovalenten Bindung endotherm oder exotherm? Wie ist es mit dem Brechen einer kovalenten Bindung? Erläutern Sie Ihre Antwort.
 - e) Definieren Sie den Begriff "Bindungsenthalpie".
2. Machen Sie sich mit den Bedienelementen der Simulation B vertraut. Vergewissern Sie sich, dass Sie die Atome bewegen, Bindungen brechen und bilden, so wie die Anzahl der Ausgangsmoleküle wählen können. Überprüfen Sie damit, dass Sie für die Teilschritte des Beispielreaktionswegs in (2a-i) die gleichen Energiewerte erhalten können.

Hauptaufgaben

(während der Übung zu bearbeiten)

1. Beantworten Sie die folgenden Fragen mithilfe der Simulation A.
 - a) Bestimmen Sie die Bildungsenthalpie der H-H-Bindung in kJ/mol.
 - b) Die Bindungsenthalpie der F-F-Bindung, die eine Länge von 141,2 pm hat, beträgt 155 kJ/mol. Diskutieren Sie mit Ihren Kommilitonen, wie das Diagramm der potentiellen 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.
2. Bestimmen Sie mit der Simulation B die Enthalpie der folgenden Reaktion über verschiedene Wege:
$$\text{CH}_4 (\text{g}) + 2\text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2 (\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O} (\text{g})$$



- a) Simulieren Sie dazu verschiedene Reaktionswege, welche die unten genannten Bedingungen erfüllen und bei denen die oben genannten Produkte entstehen. Für jeden Weg Schreiben Sie die Reaktionsgleichungen und die Enthalpieänderungen der Teilschritte auf und stellen Sie sicher, dass am Ende jedes Schritts nur physikalisch mögliche Moleküle vorhanden sind.

(i) Beispiel-Reaktionsweg: enthält Methylenglykol ($\text{CH}_2(\text{OH})_2$) 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: $\text{CH}_2(\text{OH})_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$, $\Delta H = -487 \text{ kJ/mol}$

(ii) Reaktionsweg 1: sollte Kohlenstoff (C), Wasserstoff (H_2) und Sauerstoff (O_2) als einzige Zwischenprodukte enthalten.

(iii) Reaktionsweg 3: sollte Methanol (CH_3OH) als Zwischenprodukt enthalten



- b) Wie hoch ist die gesamte Enthalpieänderung für die Reaktion über jeden Weg? Entspricht sie Ihren Erwartungen? Erläutern Sie.
- c) Die experimentelle Verbrennungsenthalpie von Methangas beträgt -891 kJ/mol und unterscheidet sich damit von den Werten, die Sie bei der Durchführung der Reaktion aus Simulation B erhalten. Erklären Sie die Ursache für diese Diskrepanz und verwenden Sie weitere bereitgestellte Informationen (s. *Hilfe*-Menü), um die beiden Enthalpiewerten miteinander in Einklang zu bringen.
- d) Definieren Sie den Begriff Standardbildungsenthalpie, ΔH_f° .
- e) Schreiben Sie die Gleichung für die Standardbildung von Ameisensäure (gasförmig) auf und verwenden Sie Simulation B und andere bereitgestellte Informationen, um ihr ΔH_f° zu ermitteln.
- f) Schreiben Sie die Gleichung für die Standardbildung von Methangas auf und verwenden Sie Simulation B und weitere bereitgestellte Informationen, um ihr ΔH_f° zu ermitteln.
- g) Verwenden Sie Simulation B, um die Enthalpie der folgenden Reaktion zu bestimmen:



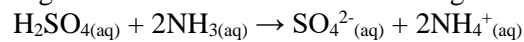
- h) Wie hängt die Enthalpieänderung in (g) mit den Bildungsenthalpien in (e) und (f) zusammen? Welche Rolle spielen die Bildungsenthalpien von Sauerstoff ($\text{O}_2(\text{g})$) und Wasserstoff ($\text{H}_2(\text{g})$)?

3. Was ist die 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) $3\text{H}_2(\text{g}) + 2\text{N}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NH}_3(\text{g})$
 d) $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g}) \rightarrow 2\text{NO}_2(\text{g})$

- e) *Bonusfrage:* Stellen Sie sich vor, dass die Reaktion 3d in einem Behälter mit einstellbarem Volumen durchgeführt wird. Welche Auswirkung hätte eine Verringerung des Volumens des Behälters auf die Produktion von $\text{NO}_{2(g)}$? Erläutern Sie Ihre Antwort!
4. Ein Kommilitone von Ihnen macht folgende Aussage: "*Exotherme Reaktionen laufen bei niedrigen Temperaturen spontan ab.*"
- Nennen Sie einen Unterschied zwischen der Bezeichnung von exotherm/endotherm und der Bezeichnung von spontan/nicht spontan!
 - Geben Sie die Gleichung zur Bestimmung der Spontaneität einer Reaktion an.
 - Benutze die Gleichung, um die Aussage deines Kommilitonen zu bewerten.
 - Wie hängt die Spontaneität der Reaktion, wenn überhaupt, mit der Geschwindigkeit der Reaktion zusammen?

5. Betrachten Sie die folgende allgemeine Reaktion zwischen wässriger Schwefelsäure und Ammoniak:

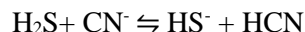


Schreiben Sie alle verschiedenen Möglichkeiten auf, wie die Reaktionsgeschwindigkeit ausgedrückt werden kann. Die erste Art ist als Beispiel angegeben.

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

6. Wie lauten die Einheiten der Reaktionsgeschwindigkeit? _____
7. Die Kollisionstheorie besagt, dass die Geschwindigkeit einer Reaktion proportional zur Anzahl der erfolgreichen Kollisionen zwischen den Reaktionsteilnehmern ist.
- Wie nennt man die Energieschwelle, die überwunden werden muss, damit eine Kollision eine Reaktion "erfolgreich" auslöst?
 - 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.
 - 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!
 - Bei Raumtemperatur stoßen Teilchen mit einer durchschnittlichen kinetischen Energie von etwa 2,5 kJ/mol zusammen. Stellen Sie sich eine Reaktion vor, die spontan verläuft, aber eine Aktivierungsenergie von 3,5 kJ/mol hat. Wird diese Reaktion bei Raumtemperatur überhaupt ablaufen? Erläutern Sie Ihre Antwort.

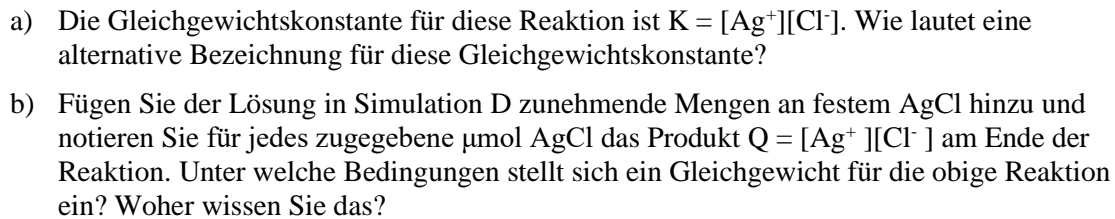
8. Öffnen Sie die Simulation D und betrachten Sie die erste Reaktion:



- Drücken Sie die Geschwindigkeit der Hinreaktion in Abhängigkeit von den Konzentrationen der Reaktanten aus. Überprüfen Sie Ihre Antwort mit Ihren Kommilitonen.
- Wiederholen Sie den Vorgang für die Geschwindigkeit der Rückreaktion.
- Ist es möglich, alle Moleküle H_2S in HS^- umzuwandeln? Warum oder warum nicht?
- Was passiert mit den Konzentrationen der Reaktanten und Produkte nach ~40 ms? Was geschieht mit der Hin- und Rückreaktionsgeschwindigkeit nach dieser Zeit?



9. Wechseln Sie zur zweiten in Simulation D verfügbaren Reaktion:



Ausgangsmenge AgCl (μmol)	$[\text{Ag}^+] = [\text{Cl}^-]$ in ($\mu\text{mol L}^{-1}$)	Q ($\mu\text{mol}^2 \text{L}^{-2}$)

- c) Verwenden Sie die Informationen aus Simulation D, um den Wert von K (in $\text{mol}^2 \text{L}^{-2}$) für diese Reaktion zu bestimmen.
 - d) Berechnen Sie die Löslichkeit von $\text{AgCl}_{(\text{s})}$ in mg/L unter diesen Bedingungen.
 - e) Setzen Sie Simulation D mit der minimalen Menge von AgCl zurück. Geben Sie $30.0 \mu\text{mol}$ 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, wenn überhaupt?
 - f) Wie wird die Löslichkeit von $\text{AgCl}_{(\text{s})}$ durch das bereits in Lösung befindliche Ag-Ion^+ beeinflusst? Berechnen Sie die Löslichkeit von $\text{AgCl}_{(\text{s})}$ in mg/L unter diesen Bedingungen.
10. Warum wurden bei den Gleichgewichtskonstanten der vorherigen Fragen die "Konzentrationen" von Wasser und Feststoffen vernachlässigt?
11. 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

12. *Bonusfrage*: Betrachten Sie die Werte der Gleichgewichtskonstanten für die Reaktionen in Frage 8 und 9. Was lässt sich über die Spontanität der beiden Reaktionen sagen?

