

Energieänderungen, Geschwindigkeiten und Gleichgewichte von Reaktionen



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

BONUS

= optionale Frage

Vorbereitungsaufgaben

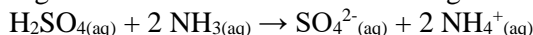
(vor der Übung zu bearbeiten)

1. Simulation A zeigt die Veränderungen der potenziellen Energie (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 elektrostatische Abstoßung und Anziehung, 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. Erklären Sie, warum das *nicht* gegen das Prinzip der Energieerhaltung verstößt. 
 - c) Definieren Sie die Begriffe „endotherm“ und „exotherm“ in Bezug auf eine chemische Reaktion.
 - d) Ordnen Sie die Begriffe „endotherm“ und „exotherm“ der Bildung und dem Bruch einer kovalenten Bindung zu. Erläutern Sie Ihre Antwort.
 - e) Definieren Sie den Begriff „Bindungsenergie“ (oder Bindungsenthalpie).

2. Machen Sie sich mit den Bedienelementen der Simulation B vertraut. Vergewissern Sie sich, dass Sie Atome bewegen, Bindungen brechen und bilden, sowie die Anzahl der Ausgangsmoleküle wählen können. Prüfen Sie, ob Sie für die Teilschritte des Beispielreaktionswegs in Hauptaufgabe 2a-i die angegebenen Energiewerte erhalten.

3. Definieren Sie den Begriff Standardbildungsenthalpie, ΔH_f° .

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



Schreiben Sie drei verschiedenen Möglichkeiten auf, wie die Reaktionsgeschwindigkeit mathematisch ausgedrückt werden kann. Eine Möglichkeit ist als Beispiel angegeben.

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


5. Wie lauten die Einheiten der Reaktionsgeschwindigkeit? _____

Hauptaufgaben

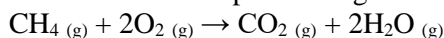
(während der Übung zu bearbeiten)

1. Beantworten Sie die folgenden Fragen mithilfe der Simulation A.

- a) Bestimmen Sie die Bindungsenthalpie 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 potenziellen Energie in Abhängigkeit vom Kernabstand 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:



- a) Simulieren Sie dazu verschiedene theoretische Reaktionswege, welche die unten genannten Bedingungen ((ii) bzw. (iii)) erfüllen und bei denen die oben genannten Produkte am Ende 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: sollte Methylen glykol ($\text{CH}_2(\text{OH})_2$) als Zwischenprodukt enthalten:

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.

BONUS

- (iii) Reaktionsweg 2: sollte Methanol (CH_3OH) als Zwischenprodukt enthalten



- b) Wie hoch ist jeweils die gesamte Enthalpieänderung für die Reaktion? 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 Enthalpiewerte miteinander in Einklang zu bringen.

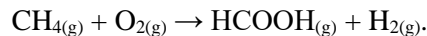


- d) Schreiben Sie die Gleichung für die Standardbildung von gasförmiger Ameisensäure ($\text{HCOOH}_{(g)}$) auf und verwenden Sie Simulation B und andere bereitgestellte Informationen, um ihr ΔH_f° zu ermitteln.

- e) Schreiben Sie die Gleichung für die Standardbildung von Methangas ($\text{CH}_4_{(g)}$) auf und verwenden Sie Simulation B und weitere bereitgestellte Informationen, um den ΔH_f° -Wert von Methangas zu ermitteln.



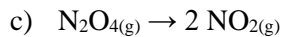
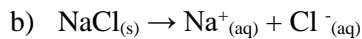
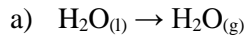
- f) Bestimmen Sie die Enthalpie ΔH_r° der folgenden Reaktion:



Sie können gerne die Simulation B und/oder Ihre vorherigen Antworten als Hilfe nehmen. Welche Rolle spielen die Bildungsenthalpien von Sauerstoff ($\text{O}_{2(g)}$) und Wasserstoff ($\text{H}_{2(g)}$) in

Ihrer Antwort?

3. Was ist die Entropie? Bestimmen Sie für die folgenden Prozesse, ob sie zu einer Zunahme oder einer Abnahme der Entropie führen. Erklären Sie jeweils, warum.



BONUS

- d) Stellen Sie sich vor, dass die Reaktion 3c 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 stellt die folgende Hypothese auf: "*Exotherme Reaktionen laufen bei niedrigen Temperaturen spontan ab.*"

a) Nennen Sie einen Unterschied zwischen den Bezeichnungen *exotherm* und *spontan*!

b) Geben Sie die Gleichung zur Bestimmung der Spontaneität einer Reaktion an.

c) Benutzen Sie die Gleichung, um die Hypothese Ihres Kommilitonen (oben) zu bewerten.


BONUS

- d) Hängt die Spontaneität der Reaktion mit der Geschwindigkeit der Reaktion zusammen? Wenn ja, wie?

5. 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) Als Anfangsbedingungen in der Simulation C werden eine Temperatur von 300 K und eine Aktivierungsenergie von 5 kJ/mol verwendet. Probieren Sie für jede dieser Variablen einen anderen Wert aus und beobachten Sie, nachdem Sie die Simulation etwas laufen gelassen, wie sich jede Variable auf die Anzahl der gelb gefärbten Teilchen auswirkt.

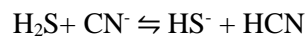
- c) Erläutern Sie anhand Ihrer Beobachtungen und in Bezug auf die Bewegung der Teilchen, wie sich (i) eine Temperaturerhöhung oder (ii) die Zugabe eines Katalysators auf die Reaktionsgeschwindigkeit auswirkt. 


- d) Schreiben Sie die Arrhenius-Gleichung auf (s. *Hilfe-Menü*) und überprüfen Sie, ob die von Ihnen in Teil (b) beschriebenen Effekte auch mathematisch nachvollziehbar sind (z. B. wie sich die Reaktionsgeschwindigkeit ändert, wenn andere Variablen steigen oder sinken)!

BONUS

- e) 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.

6. Öffnen Sie die Simulation D und betrachten Sie die erste Reaktion, die im wässrigen Medium abläuft:



- a) Drücken Sie die Geschwindigkeit der Hinreaktion in Abhängigkeit von den Konzentrationen der Reaktanten aus. Vergleichen Sie untereinander Ihre Antworten. 

- b) Wiederholen Sie den Vorgang für die Geschwindigkeit der Rückreaktion.

- c) Was passiert mit den Konzentrationen der Reaktanten und Produkte nach ~35 ms? Was geschieht mit der Hin- und Rückreaktionsgeschwindigkeit nach dieser Zeit?
- d) Geben Sie die Gleichgewichtskonstante K für diese Reaktion an. Verwenden Sie die Informationen aus der Simulation, um den Wert von K zu berechnen.

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



- 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 jeweils das Produkt $Q = [\text{Ag}^+][\text{Cl}^-]$ am Ende des Auflösungsprozesses. Unter welchen Ausgangsbedingungen stellt sich ein Gleichgewicht für die Reaktion oben ein? Woher wissen Sie das?



Ausgangsmenge AgCl (μmol)	$[\text{Ag}^+] = [\text{Cl}^-]$ nach der Auflösung (μmol L ⁻¹)	Q nach der Auflösung (μmol ² L ⁻²)
4,0	4,0	16
8,0		
12,0		
16,0		
20,0		

- c) Verwenden Sie Informationen aus Simulation D und Ihrer Tabelle in (b), um den Wert von K (in mol² L⁻²) für diese Reaktion zu bestimmen.



- d) Berechnen Sie die Löslichkeit von AgCl_(s) in mg/L unter diesen Bedingungen.
- e) Setzen Sie Simulation D auf 1 μmol von AgCl zurück. Geben Sie 30 μmol Silbernitrat (AgNO₃) in die Lösung und fügen Sie dann nach und nach AgCl_(s) in Schritten von 1 μmol hinzu, bis die Lösung gesättigt ist. Unterscheidet sich der Wert von K in dieser Situation?
- f) Wie wird die Löslichkeit von AgCl_(s) durch die bereits in Lösung vorhandenen Ag⁺-Ionen beeinflusst? Berechnen Sie die Löslichkeit von AgCl_(s) in mg/L unter diesen Bedingungen.

BONUS

8. Das Löslichkeitsprodukt von Ag_2CrO_4 (molare Masse $331,73 \text{ g mol}^{-3}$) 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 Lösungen (a) und (b) gelöst werden kann:

a) 1,0 L Wasser

b) 1,0 L einer $0,050 \text{ mol L}^{-1}$ Lösung von K_2CrO_4 in Wasser

BONUS

9. Betrachten Sie die Werte der Gleichgewichtskonstanten für die Reaktionen in Frage 6 und 7. Was lässt sich über die Spontanität der beiden Reaktionen sagen?

