

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.

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 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 drei 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 „existierende“ Moleküle vorhanden sind (d. h. es sollte eine Bindung je Wasserstoffatom, vier Bindungen je Kohlenstoffatom und zwei Bindungen je Sauerstoffatom geben).

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

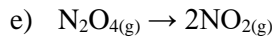
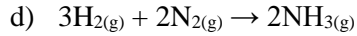
(ii) Reaktionsweg 1: sollte Kohlenstoff (C), Wasserstoff (H_2) und Sauerstoff (O_2) als einzige Zwischenprodukte enthalten.

(iii) Reaktionsweg 2: sollte Ameisensäure (HCOOH) als Zwischenprodukt enthalten

(iv) 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 achten Sie dabei besonders auf die Edukte und Produkte, die an der Verbrennung von Methan beteiligt sind.
- d) Definieren Sie den Begriff Standardbildungsenthalpie, ΔH_f° .
- e) 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. 
- f) 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.
- g) Verwenden Sie Simulation B, um die Enthalpie der folgenden Reaktion zu bestimmen:
- $$\text{CH}_{4(g)} + \text{O}_{2(g)} \rightarrow \text{HCOOH}_{(g)} + \text{H}_{2(g)}$$
- h) Wie hängt die Enthalpieänderung in (g) mit den Bildungsenthalpien in (e) und (f) zusammen? Welche Rolle spielen die Bildungsenthalpien von Sauerstoff ($\text{O}_{2(g)}$) und Wasserstoff ($\text{H}_{2(g)}$)?
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.
- $\text{H}_2\text{O}_{(l)} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_{(g)}$
 - $\text{NaCl}_{(s)} \rightarrow \text{Na}^+_{(aq)} + \text{Cl}^-_{(aq)}$
 - $\text{C}_{10}\text{H}_8_{(s)} \rightarrow \text{C}_{10}\text{H}_8_{(g)}$

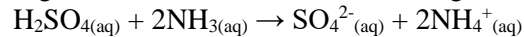


Bonusfrage: Stellen Sie sich vor, dass die Reaktion 3e in einem Behälter mit einstellbarem Volumen durchgeführt wird. Welche Auswirkung hätte eine Verringerung des Volumens des Behälters auf die Produktion von $\text{NO}_{2(g)}$? Erläutern Sie Ihre Antwort!

4. Ein Kommilitone von Ihnen macht folgende Aussage: "*Exotherme Reaktionen laufen bei niedrigen Temperaturen spontan ab.*"

- Was ist der 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, mit der die Reaktion abläuft, 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.

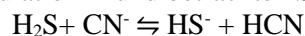
Reaktionsgeschwindigkeit = $-\frac{d[\text{H}_2\text{SO}_4]}{dt}$ = = =

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!

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.
- 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?

- e) Geben Sie die Gleichgewichtskonstante K für diese Reaktion an. Verwenden Sie die Informationen aus der Simulation, um den Wert von K zu berechnen.

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



- 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 Simulation D, um den Wert von K für diese Reaktion zu bestimmen.
- d) Berechnen Sie die Löslichkeit von $\text{AgCl}_{(s)}$ 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 $\text{AgCl}_{(s)}$ 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 $\text{AgCl}_{(s)}$ durch das bereits in Lösung befindliche Ag-Ion⁺ beeinflusst?
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?

