

# AK MiniLabor

## 4. Kategorie: Chemie & Animationen



### ReakSim

(Kollisionstheorie) Chemische Reaktionen im Internet

#### Beschreibung


Eigentlich sollte man die App „spielerisch“ kennenlernen.

Dem „Sack“-Modell von G. Harsch nachprogrammiert. Es kommen farbige Kugeln in einen Sack die gezogen werden. Nach bestimmten Regeln und Wahrscheinlichkeiten (Würfeln) werden Sie in Kugeln anderer Farben getauscht und zurückgelegt.

Das Erstaunliche: Mit wenigen (160) Teilchen lässt sich die Chemie vieler Teilchen ( $\sim 10^{23}$ ) getreu erspielen.

#### Bedienung

1. Beispiel: Simulation der Veresterung  $A + B \rightleftharpoons C + D$   
Rot + blau grün + gelb












Beim Programmstart werden alle Reaktionen mit möglichen wirksamen Kollisionen gezeigt  
Voreingestellt  sind die Kollisionen, die auch beim Estergleichgewicht vorliegen.

### ReakSim - "Chemie" mit kleinen Kugeln - Kollisionstheorie






















In dieser App werden Kugeln gezogen und nach bestimmten Regeln getauscht oder zurückgelegt. Sie kann Datensätze erzeugen, die mit experimentell ermittelten Daten zur Deckung zu bringen sind.  
Wichtige weitere Informationen mit dem "Info" - Button

Bei Reaktionen, die mit Rückreaktionen verknüpft sind, gelangt man zum chemischen Gleichgewicht und man studiert das


#### Massen Wirkungs G esetz

Auswahl	Kollisionsregel
<input type="radio"/>	 >>   >> 
<input type="radio"/>	 +  >>  +   +  >>  + 
<input checked="" type="radio"/>	 +  >>  +   +  >>  + 

Übungen zur Kinetik weiterer Reaktionen

Auswahl	Kollisionsregel	Reaktion
<input type="radio"/>	 >> 	0. Ordnung
<input type="radio"/>	 >> 	1. Ordnung
<input type="radio"/>	 +  >>  + 	2. Ordnung
<input type="radio"/>	 +  >>  + 	Autokatalyse
<input type="radio"/>	 >>   >> 	Folgereaktion
<input type="radio"/>	 +  >>  +   +  >>  +   +  >>  + 	Oszillierende Reaktion

Starten

Ein Klick auf das danebenstehende Hamburger Menüicon  zeigt die entsprechenden Voreinstellungen und Wahrscheinlichkeiten für die ausgewählte Simulation:

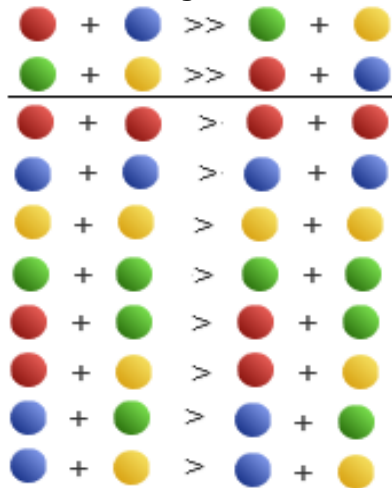
Anzahl der Teilchen beim Start: Rote K.: 80, blaue K.: 80, grüne K.: 0 und gelbe K.: 0,

Wahrscheinlichkeiten der Ziehungen:  $W_{\text{Hin}}$ : 100%,  $W_{\text{Rück}}$ : 25%

Erfolgreiche  
Kollisionen  
Hinreaktion  
Rückreaktion

Daraus ergeben  
sich Kollisionen,  
die keine Reaktion  
ergeben

### Übersicht: Ziehungen



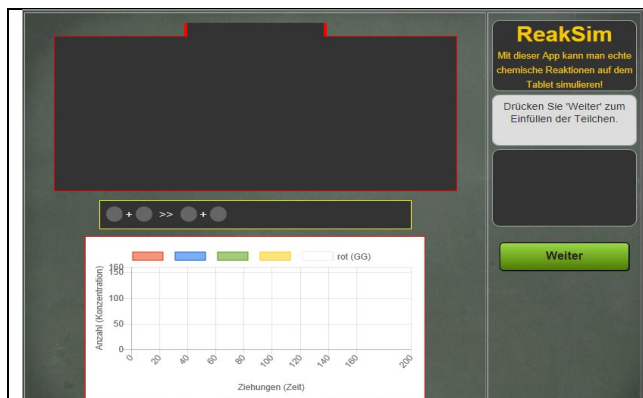
### Übersicht: Voreinstellungen

Einstellungen

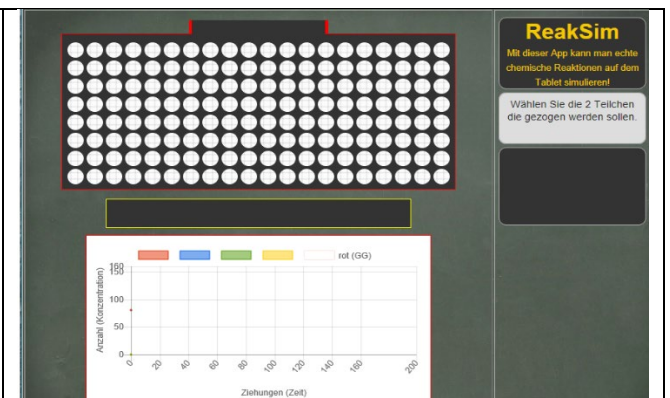
Anzahl	
<input type="range"/>	80
<input type="range"/>	80
<input type="range"/>	0
<input type="range"/>	0
Wahrscheinlichkeit	
<input type="range"/>	100 %
<input type="range"/>	25 %

OK

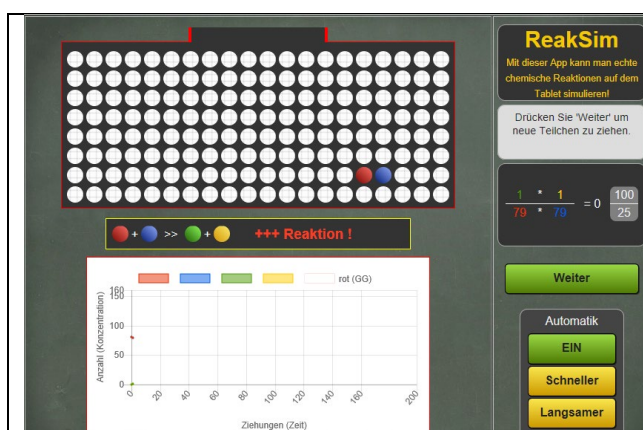
Die Einstellungen können mit den Schiebern oder durch Antippen der entsprechenden Ziffern verändert werden. Dann **OK**. Mit Klick auf **Start** gelangt man zum eigentlichen Simulationsbildschirm.



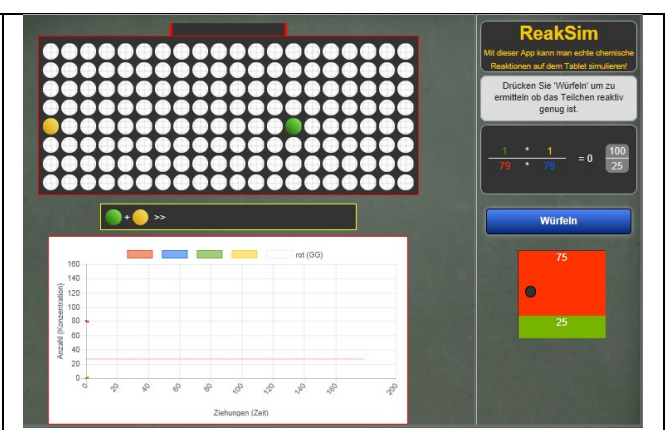
Im weißen Feld (rechts oben) stehen die Anweisungen für Sie und die Erklärungen dazu. Die Bedienung wird im Folgenden sofort deutlich: Lesen, Ausführen und auf **Weiter** Klicken. Zum unkenntlich Machen der Teilchen auf **Weiter** Klicken.



Hier soll man nun willkürlich zwei der unkenntlich gemachten Kugeln durch Antippen ziehen.



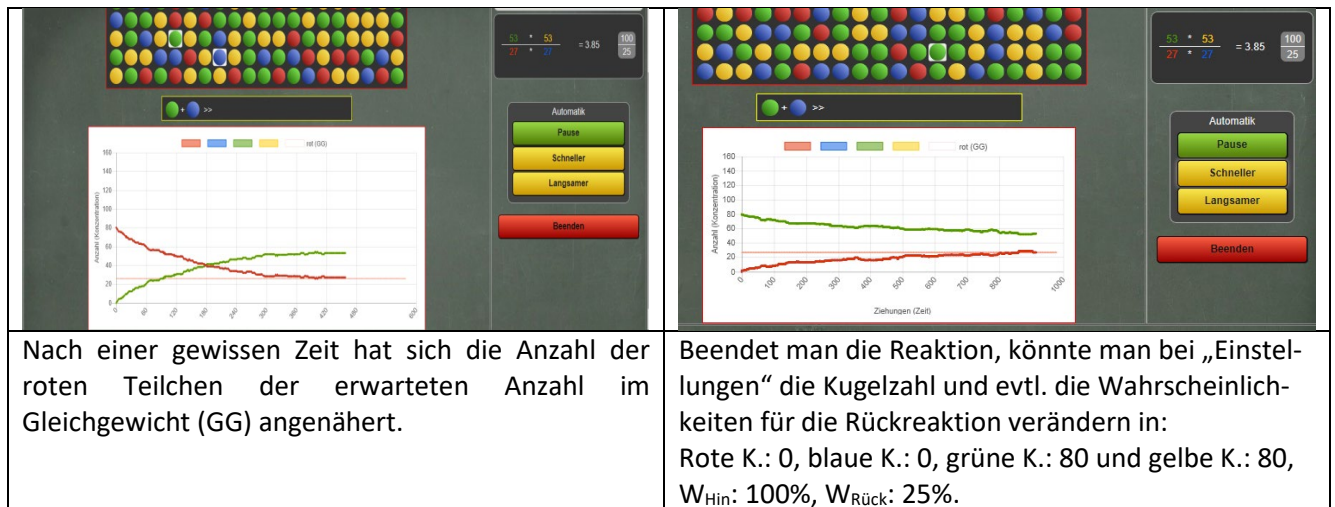
Hat man zwei Kugeln gezogen, werden diese zwischen Reaktionsgefäß und Graph in den schwarz unterlegten Reaktionskasten gezeichnet und man muss, falls erforderlich, die Wahrscheinlichkeit für die Reaktion erwürfeln.  
(Hier: In den Einstellungen gewählt Reaktionswahrscheinlichkeit Bei  $W_{\text{Hin}}=100\%$  erübrigt sich das Würfeln)



Falls Reaktions-Wahrscheinlichkeit kleiner 100% gewählt, wird gewürfelt. Mit Klick auf **Würfeln** wird per Zufallsgenerator gewählt, ob eine Reaktion stattfindet. In Feld über dem Knopf „Würfeln“ wird angegeben, wie viele Teilchen der jeweiligen Farbe vorhanden sind und wie der Quotient der Produkte sich zum Quotienten der voreingestellten Wahrscheinlichkeiten verhält.

Wird das Ziehen zu mühselig, kann man den Computer ziehen lassen mit Automatik **Ein**. (Evtl. noch auf **Schneller** tippen).

Mit Klick auf die Farben oberhalb des Graphen kann man den grafischen Verlauf der Teilchen und die erwartete Anzahl der roten Teilchen im Gleichgewicht ein- bzw. ausblenden.



Wie man sieht, pendelt die Anzahl der roten Teilchen wieder um dieselbe Zahl, aber es dauert länger, bis das „Gleichgewicht hergestellt ist.

## Das ist das chemische Gleichgewicht!

Man kann auch die Zahl der Teilchen verändern. Dazu tippt man auf **Anpassen** und setzt bei den Einstellungen die Zahl der gelben Teilchen willkürlich wieder gleich 0. (Man nimmt alle gelben Teilchen aus dem Reaktionsgefäß. In der Realität, z.B. durch Auskreisen von Wasser, um mehr Ester (grüne Teilchen) zu erhalten). Dann auf **Fortsetzen**

Auch hier pendelt die Anzahl der roten Teilchen und damit auch die aller anderen wieder um einen konstanten Wert. Man kommt zu der Kernaussage des MWG: Stört man das Gleichgewicht z.B. durch Konzentrationsänderungen, so stellt es sich trotzdem wieder ein.

### Chemisches Gleichgewicht:



**Der Quotient aus dem Produkt der Konzentrationen der Produkte und dem Produkt der Konzentrationen der Edukte ist konstant.**

$$\text{Für: } \mathbf{A + B = C + D} \text{ gilt z. B. } \mathbf{K = \frac{c(C) * c(D)}{c(A) * c(B)} = \frac{k_{\text{Hin}}}{k_{\text{Rück}}}}$$

**Dieser Ausdruck wird MassenWirkungsGesetz MWG genannt.**

## 2. Gleichgewicht: A <-> B


Dies ist die einfachste Möglichkeit, eine Gleichgewichtseinstellung zu simulieren und zu studieren. Man kann alles sehr schnell simulieren, anschauen und auch in das "Gleichgewicht eingreifen".

Nach dem **Start der App** „ReakSim“ wählt man mit Klick auf  „Auswahl“ auf der linken Seite die obere Gleichgewichtssimulation (einfachste Kollisionen) an und kann sich dann mit Klick auf das nebenstehende Hamburger Menüicon  die entsprechenden Voreinstellungen ansehen bzw. verändern.

Rote K.: 160, blaue K.: 0, Wahrscheinlichkeit<sub>Hin</sub>: 100%, Wahrscheinlichkeit<sub>Rück</sub>: 50%. Schließen der Einstellungen mit **OK**

**Übersicht: Ziehung(en)**

Erfolgreiche Kollisionen



Ziehung, die keine Reaktion ergeben

Gibt es nicht

**Beispiele aus der Chemie:**

Umwandlung von Stoffen:  
Mutarotation bei Zuckern  
Keto-Enol-Tautomerie bei Acetessigester

**Übersicht: Voreinstellungen**

**Einstellungen**

Anzahl

160

0

Wahrscheinlichkeit

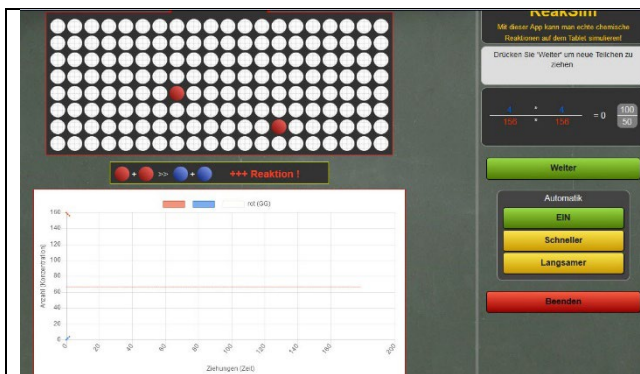
100 %

50 %

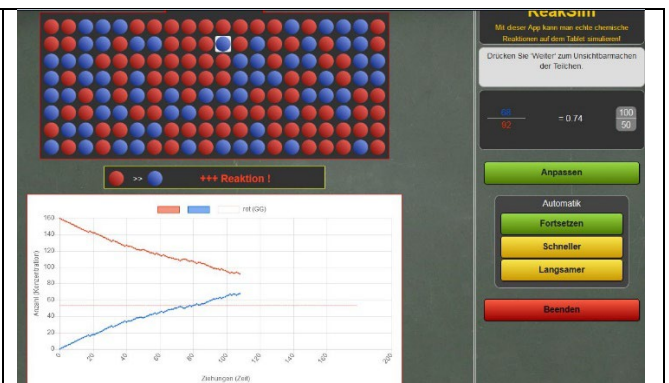
OK

Mit Klick auf **Start** gelangt man zum eigentlichen Simulationsbildschirm.

Zum Einfüllen der Teilchen auf **Weiter** klicken, zum unkenntlich Machen von diesen nochmal **Weiter** klicken. Dann willkürlich zwei der unkenntlich gemachten Kugeln durch Antippen ziehen und auf **Weiter**. Die Teilchen für die nächste Ziehung werden wieder gemischt und unkenntlich gemacht usw.



Will man den Computer arbeiten lassen, tippt man bei „Automatik auf **Ein** und **Schneller** mehrfach an. Nach einiger Zeit und Klick auf **Anhalten** erhält man z.B. das nebenstehende Bild:



Klickt man auf **Fortsetzen**, so erhält man bei den gewählten Versuchsbedingungen im Gleichgewicht ein Verhältnis von

Blaue Kugeln : rote Kugeln  $\approx 2 : 1$

### 3. Gleichgewicht. $A + A \rightleftharpoons B + B$

Hier handelt es sich auch um die Reaktionen  $A \rightleftharpoons B$ . Nur in diesem Fall müssen zwei A-Teilchen zusammenstoßen, um zwei B-Teilchen zu bilden und umgekehrt. Beide Reaktionen verlaufen nach dem Zeitgesetz zweiter Ordnung:

**Übersicht: Ziehung(en)**

Erfolgreiche Kollisionen

Ziehung, die keine Reaktion ergeben

**Beispiele aus der Chemie**

**Übersicht: Voreinstellungen**

Einstellungen

Anzahl

Wahrscheinlichkeit

OK

Mit Klick auf **Start** gelangt man zum eigentlichen Simulationsbildschirm.  
Zum Einfüllen der Teilchen auf **Weiter** klicken, zum unkenntlich Machen von diesen nochmal **Weiter** klicken. Dann willkürlich zwei der unkenntlich gemachten Kugeln durch Antippen ziehen und auf **Weiter**. Die Teilchen für die nächste Ziehung werden wieder gemischt und unkenntlich gemacht usw.

Will man den Computer arbeiten lassen, tippt man bei „Automatik auf **Ein** und den Button **Schneller** mehrfach an. Nach einiger Zeit und Klick auf **Anhalten** erhält man z.B. das nebenstehende Bild:

Klickt man auf **Fortsetzen**, so erhält man bei den gewählten Versuchsbedingungen ein Verhältnis von Blaue Kugeln : rote Kugeln  $\approx 2 : 1$



# Reaktionskinetik

## 1. Kinetik 0. Ordnung

Theorie:

Wird während des Zeitintervalls  $\Delta t$  bei einer chemischen Reaktion immer die gleiche Stoffmenge  $\Delta n$  umgesetzt (dadurch nimmt im Kolben die Konzentration um  $\Delta c$  ab), gilt das Geschwindigkeitsgesetz



$$v = - \frac{\Delta c}{\Delta t} = k \cdot c^0 \quad \text{bzw. das Konzentrations-Zeit-Gesetz} \quad c = c_0 - k \cdot t$$


und dann spricht man von einer Reaktion 0. Ordnung. Die Reaktionsgeschwindigkeit ist unabhängig von der Konzentration des eingesetzten Stoffes.

Voreinstellungen:

Rote K.: 160, Wahrscheinlichkeit<sub>Min</sub>: 100%. Wenn Sie diese Simulation auswerten wollen, muss noch eine Mindestzahl an Teilchen eingegeben werden. Unterhalb dieser Zahl ist eine sinnvolle kinetische Auswertung nicht möglich. Schließen der Einstellungen mit **OK**.

**Übersicht: Ziehung(en)**

Erfolgreiche Ziehung  >> 


Ziehung, die keine Reaktion ergeben  Gibt es nicht


**Beispiele aus der Chemie**

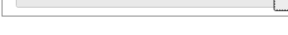
Der einfachste Fall : Die Elektrolyse: unabhängig von der Konzentration wird in gleichen Zeiten die Konzentration um den gleichen Betrag kleiner.

**Übersicht: Voreinstellungen**

**Einstellungen**

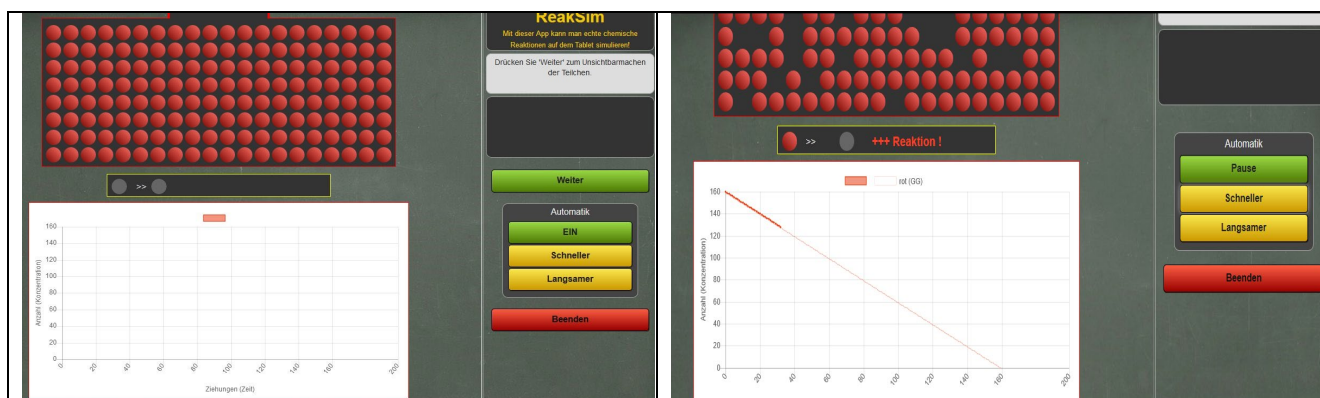
Anzahl  160

Wahrscheinlichkeit  100 %

Abbruchkriterium  10

**OK**

Start der Simulation mit **Starten**: Zum Einfüllen der Teilchen auf **Weiter** klicken,



Man drückt auf **Weiter** wodurch die Atome unkenntlich (weiß) werden. Klickt man auf ein „Atom“, so kommt es zu einer Reaktion wenn die Wahrscheinlichkeit 100 % beträgt. Ansonsten wird gewürfelt, und der Stoff A wird bei positivem Ausgang des Würfels aus dem Gefäß genommen (wie bei der Elektrolyse), oder er wandelt sich in einen inerten nicht mehr sichtbaren Stoff B um. Wird **Weiter** angeklickt, so ist nach dem Durchmischen der Moleküle ein leerer Raum.

Will man den Computer arbeiten lassen, tippt man bei „Automatik“ auf **Ein** und **Schneller** mehrfach an. Nach einiger Zeit und Klick auf **Anhalten** erhält man z.B. obiges Bild: Die Grafik zeigt den typischen Verlauf für eine Reaktion 0. Ordnung. Die erwartete Trendline kann ausgeblendet werden. Klickt man auf **Fortsetzen** wird solange weiter gezogen, bis die festgelegte Mindestzahl erreicht ist.

## 2. Kinetik 1. Ordnung

Theorie:

Wird während des Zeitintervalls  $\Delta t$  bei einer chemischen Reaktion die Stoffmenge  $\Delta n$  umgesetzt, und dabei im Kolben die Konzentration um  $\Delta c$  verkleinert wird, und das Geschwindigkeitsgesetz,

$$V = - \frac{\Delta c}{\Delta t} = k \cdot c^1 \quad \text{bzw. das Konzentrations-Zeit-Gesetz} \quad c = c_0 \cdot e^{-k \cdot t}$$

Gilt, dann spricht man von einer Reaktion 1. Ordnung. Die Reaktionsgeschwindigkeit ist abhängig von der Konzentration des eingesetzten Stoffes.

Voreinstellungen: Kategorie 1. Ordnung

Rote K.: 160, Wahrscheinlichkeit<sub>hin</sub>: 100%. Schließen der Einstellungen mit **OK**

### Übersicht: Ziehungen

Erfolgreiche  
Ziehung



Ziehung, die keine  
Reaktion ergeben



**Beispiele aus  
der Chemie**

Radioaktiver Zerfall  
Hydrolyse von tert.-Butylchlorid

### Übersicht: Voreinstellungen

**Einstellungen** ✖

---

Anzahl

100

☐

0

---

Wahrscheinlichkeit

●
●

100 %

---

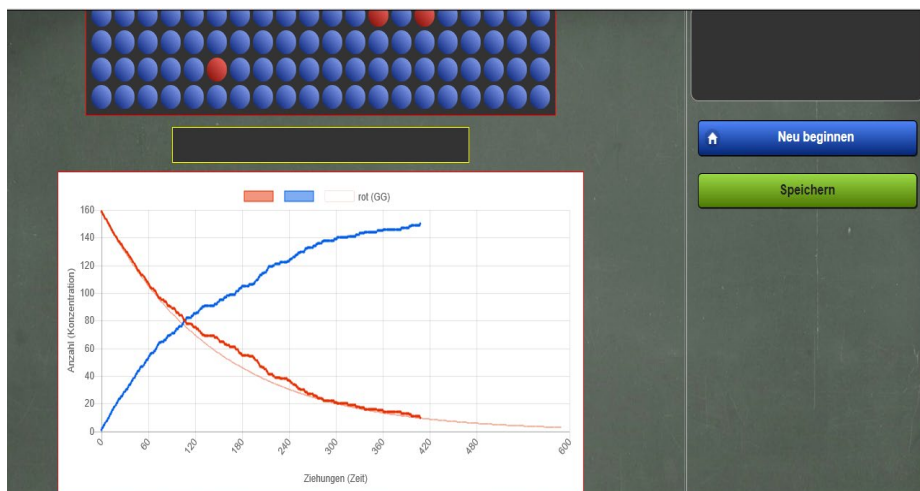
Abbruchkriterium

10

Start der Simulation mit **Starten**: Zum Einfüllen der Teilchen auf **Weiter** klicken, zum unkenntlich Machen nochmal **Weiter** klicken Dann willkürlich zwei der unkenntlich gemachten Kugeln durch Antippen ziehen und auf **Weiter**. Die Teilchen für die nächste Ziehung werden wieder gemischt und unkenntlich gemacht usw.

**Will man den Computer arbeiten lassen, tippt man bei „Automatik auf **Ein** und **Schneller** mehrfach an**

Nach einiger Zeit erhält man folgendes Bild:



### 3. Kinetik 2. Ordnung

Theorie:

Wird während des Zeitintervalls  $\Delta t$  bei einer chemischen Reaktion die Stoffmenge  $\Delta n$  umgesetzt, und nimmt im Kolben damit die Konzentration um  $\Delta c$  ab, und gilt das Geschwindigkeitsgesetz

$$v = - \frac{\Delta c}{\Delta t} = k \cdot c^2 \quad \text{bzw. das Konzentrations-Zeit-Gesetz} \quad c = \frac{c_0}{k \cdot t \cdot c_0 + 1}$$

dann spricht man von einer Reaktion 2. Ordnung. Die Reaktionsgeschwindigkeit ist abhängig vom Quadrat der Konzentration des eingesetzten Stoffes.

Voreinstellungen: Kategorie 2. Ordnung

Rote K.: 160, Wahrscheinlichkeit<sub>Hin</sub>: 100%. Schließen der Einstellungen mit **OK**

#### Übersicht: Ziehungen

Erfolgreiche Ziehung



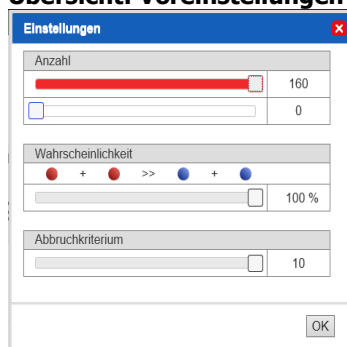
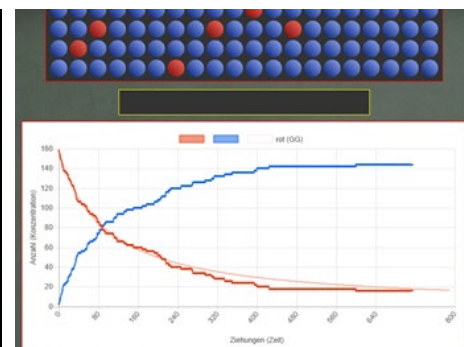
Ziehung, die keine Reaktion ergeben



**Beispiele aus der Chemie**

Reaktion von Kristallviolett mit Natronlauge

#### Übersicht: Voreinstellungen

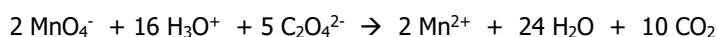



Start der Simulation mit **Starten**: Zum Einfüllen der Teilchen auf **Weiter** klicken, zum unkenntlich machen der Teilchen nochmal **Weiter** klicken. Dann willkürlich zwei der unkenntlich gemachten Kugeln durch Antippen ziehen und auf **Weiter**. Die Teilchen für die nächste Ziehung werden wieder gemischt und unkenntlich gemacht usw.

**Will man den Computer arbeiten lassen, tippt man bei „Automatik auf **Ein** und den Button **Schneller** mehrfach an.**

### 4. Autokatalyse

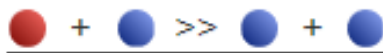
**Theorie:** Das vielleicht bekannteste Beispiel ist die Oxidation von Oxalsäure durch Kaliumpermanganat in saurer Lösung.



Voreinstellungen: Rote K.: 158, Blaue K.: 2, Wahrscheinlichkeit<sub>Hin</sub>: 100%. Schließen der Einstellungen mit **OK**

#### Übersicht: Ziehungen

Erfolgreiche Ziehung



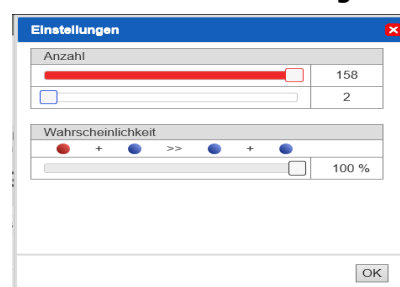
Ziehung, die keine Reaktion ergeben



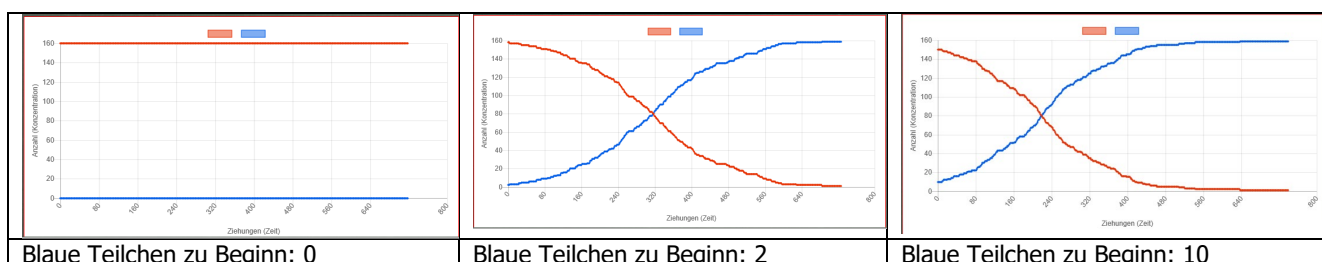
**Beispiele aus der Chemie**

Die Reaktion von Oxalsäure mit Kaliumpermanganat; die entstehenden Mangan(II)-Ionen wirken katalytisch

#### Übersicht: Voreinstellungen



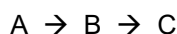
Start der Simulation mit **Starten**: Inzwischen wie gewohnt: Zum Einfüllen der Teilchen auf **Weiter** klicken, zum unkenntlich machen nochmal **Weiter** klicken. Dann willkürlich zwei der unkenntlich gemachten Kugeln durch Antippen ziehen und auf **Weiter**. Die Teilchen für die nächste Ziehung werden wieder gemischt und unkenntlich gemacht usw.





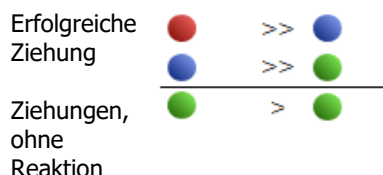
## 5. Folgereaktion

Folgereaktionen sind dadurch gekennzeichnet, dass sich ein Stoff A zunächst in B umwandelt, der seinerseits wieder in einen weiteren Stoff C übergeht.



Voreinstellungen: Rote K.: 120, Blaue K.: 40, Grüne K.: 0, Wahrscheinlichkeit<sub>Hinrot</sub>: 100%. Wahrscheinlichkeit<sub>Hinblau</sub>: 100%. Schließen der Einstellungen mit **OK**

### Übersicht: Ziehung(en)



### Beispiele aus der Chemie

Sehr viele biochemische Reaktionen führen vom Ausgangsstoff A über B zu einem oder weiteren Folgeprodukten C

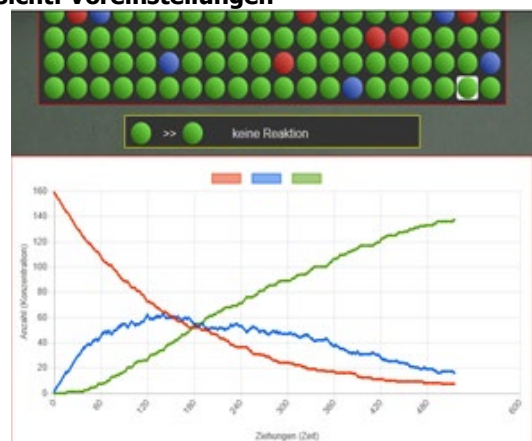
### Übersicht: Voreinstellungen

**Einstellungen**

Anzahl

Wahrscheinlichkeit

OK



Start der Simulation mit **Starten**: Inzwischen wie gewohnt: Zum Einfüllen der Teilchen auf **Weiter** klicken, zum unkenntlich Machen nochmal **Weiter** klicken. Dann willkürlich zwei der unkenntlich gemachten Kugeln durch Antippen ziehen und auf **Weiter**. Die Teilchen für die nächste Ziehung werden wieder gemischt und unkenntlich gemacht usw.

**Soll der Computer arbeiten, tippt man bei „Automatik auf Ein und den Button Schneller mehrfach an.**

Man sieht, dass am Anfang kaum „grünes Produkt“ entsteht. Erst wenn genügend blaue Teilchen entstanden sind (die Anzahl durchläuft ein Maximum und nimmt dann ab), verläuft die Reaktion solange, bis bei den hier gewählten Reaktionsbedingungen am Ende hauptsächlich grüne Teilchen im Reaktionsgefäß sind.

## 6. Oszillierende Reaktion

Oszillierende Reaktionen sind komplizierte chemische Abläufe mit mehreren Zwischenprodukten, bei denen Konzentrationen der Produkte periodische Schwankungen aufweisen, die sich zum Beispiel durch Farbänderungen bemerkbar machen können. Voreinstellungen:

Rote K.: 80, blaue K.: 40, grüne K.: 40, Wahrscheinlichk.<sub>r+b</sub>: 100%, Wahrscheinlichk.<sub>b+g</sub>: 50%. Wahrscheinlichk.<sub>r+g</sub>: 50%. Schließen der Einstellungen mit **OK**

### Übersicht: Ziehung(en)



### Beispiele aus der Chemie

Belousov-Zhabotinsky-Reaktion

### Übersicht: Voreinstellungen

**Einstellungen**

Anzahl

Wahrscheinlichkeit

OK



Start der Simulation mit **Starten**: Inzwischen wie gewohnt: Zum Einfüllen der Teilchen auf **Weiter** klicken, zum unkenntlich Machen nochmal **Weiter** klicken. Dann willkürlich zwei der unkenntlich gemachten Kugeln durch Antippen ziehen und auf **Weiter**. Die Teilchen für die nächste Ziehung werden wieder gemischt und unkenntlich gemacht usw.

Will man den Computer arbeiten lassen, tippt man bei „Automatik auf Ein und den Button Schneller mehrfach an.

Man sieht sehr schön, wie die einzelnen Konzentrationen periodisch Minima und Maxima durchlaufen.

Mit **Beenden** kann man zum Startmenü zurückkehren.

Auch Ökosysteme reagieren oft oszillierend und können mit der App simuliert werden.