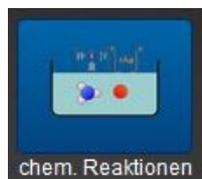


AK MiniLabor

4. Kategorie: Chemie & Animationen

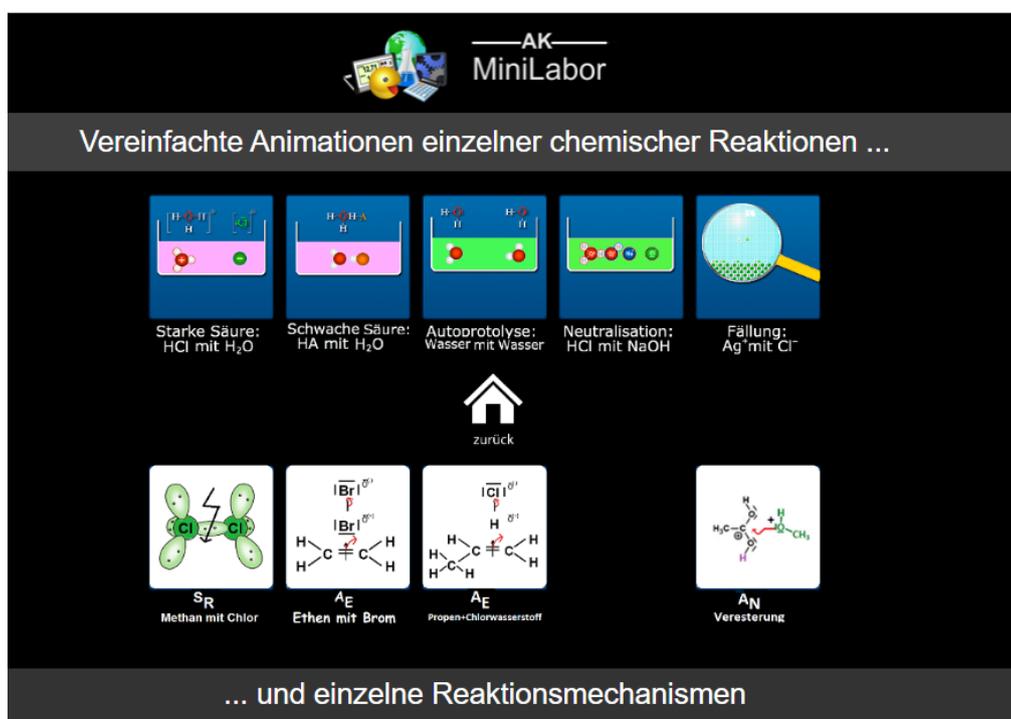


Chemische Reaktionen / Reaktionsmechanismen

Programmbeschreibung:

Die wichtigste Aufgabe der App ist, Abläufe chemischer Reaktionen bzw. Reaktionsmechanismen vorstellbar zu machen.

Alle hier in der oberen Reihe aufgeführten Simulationen sind sehr ähnlich aufgebaut. Die "Reaktionen" finden in einem "Reaktionsgefäß" statt. Der Ablauf wird an so wenig Teilchen wie möglich verdeutlicht.



Bedienung:

Allgemeines und Einstellungen

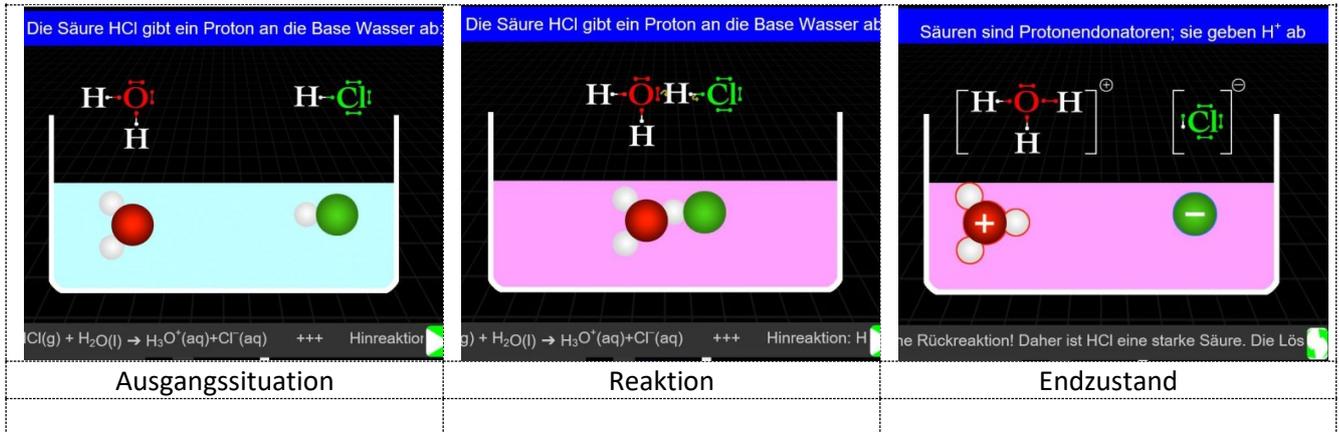
| | |
|---------------------------|--|
| | In der linken oberen Ecke der Bildschirme finden sich drei Striche (= Symbol für ein Einstellmenü, ein sogenanntes Hamburger Menü-Icon). |
| Lone-pair-Darstellung EIN | Die Atome können mit freien Elektronenpaaren dargestellt werden. |
| Ton ausschalten | |
| Raster ausschalten | Es kann ein dreidimensionaler Raum angedeutet werden. |
| Texte einschalten | Der untere Lauftext (Kommentare oder Reaktionsgleichungen), kann ausgeblendet werden, damit die Schüler ihre Kommentare dazu abgeben können. |
| Menu schliessen | |

| | | | | | | | | | | | | | |
|--|---|---|---|---|--------------------|---|-------------------|---|-----------------|--|--|--|--|
|  Programmstart |  Wiederholen |  „Reaktionslupe“ |  Zum Menü: Reaktionen | | | | | | | | | | |
|  | <p>In der linken oberen Ecke der Bildschirme finden sich drei Striche (= Symbol für ein Einstellmenü, ein sogenanntes Hamburger Menü-Icon).</p> | | | | | | | | | | | | |
| <table border="1"> <tr> <td>Lone-pair-Darstellung EIN</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Ton ausschalten</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Raster ausschalten</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Texte einschalten</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Menu schliessen</td> <td></td> </tr> </table> | Lone-pair-Darstellung EIN |  | Ton ausschalten |  | Raster ausschalten |  | Texte einschalten |  | Menu schliessen | | <p>Die Atome können mit freien Elektronenpaaren dargestellt werden.</p> <p>Es kann ein dreidimensionaler Raum angedeutet werden.</p> <p>Der untere Lauftext (Kommentare oder Reaktionsgleichungen), kann ausgeblendet werden, damit die Schüler ihre Kommentare dazu abgeben können.</p> | | |
| Lone-pair-Darstellung EIN |  | | | | | | | | | | | | |
| Ton ausschalten |  | | | | | | | | | | | | |
| Raster ausschalten |  | | | | | | | | | | | | |
| Texte einschalten |  | | | | | | | | | | | | |
| Menu schliessen | | | | | | | | | | | | | |

Starke Säure: HCl mit H₂O

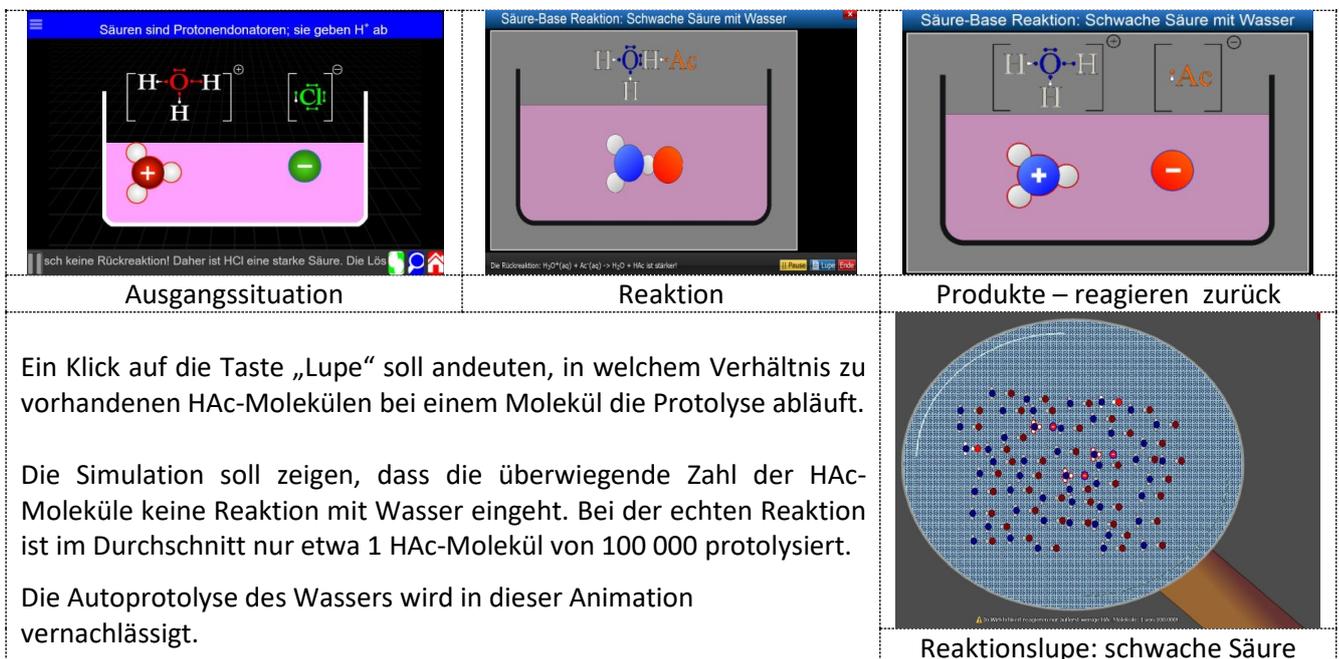
Die Animationen zeigen die Vorgänge bei der Protolysereaktion zwischen HCl und Wasser.

Bei der Hinreaktion sieht man, wie von HCl ein Proton abgespalten wird und dieses zum Wassermolekül wandert. Dann bleibt die Animation stehen. Dies soll andeuten, dass keine Rückreaktion erfolgt.



Schwache Säure: HAc (z.B. Essigsäure) mit H₂O

Der Unterschied zwischen der Reaktion von starker Säure mit Wasser und der von schwacher Säure mit Wasser wird in dieser Bildfolge klar: Hier beginnt die Animation immer wieder von vorn. Das soll andeuten, dass bei der schwachen Säure immer Hin- und Rückreaktion ablaufen. Das Gleichgewicht der Reaktion liegt "etwas mehr" auf Seiten der schwachen Säure. Mit Klick auf „Pause“ kann die Simulation angehalten werden.



Autoprotolyse: H₂O mit H₂O

Es hört sich zunächst merkwürdig an: Die Reaktion von Wasser mit Wasser. Welche Vorgänge laufen bei der Autoprotolyse von Wasser ab? Diese Simulation der Vorgänge soll Klarheit schaffen.

Es wird zunächst im Großbild gezeigt, wie die Protolyse zwischen einem Wassermolekül (rechts hier: als Säure) und einem anderen Wassermolekül (links hier: als Base) abläuft. Es kommt somit kurzzeitig zur Bildung eines Oxoniumions und eines Hydroxidions. Die Reaktion verläuft aber sofort schnell wieder rückwärts in Richtung der Ausgangsmoleküle. Hier liegt eine Gleichgewichtsreaktion vor: Die Präsentation der Bilder ist fortlaufend. (Nach zweimal Hin- und Rückreaktion ist 15 Sekunden Pause)

| | | |
|--|----------|---------------------------------|
| | | |
| Ausgangssituation | Reaktion | Produkte - sie reagieren zurück |
| <p>Ein Klick auf die Taste „Lupe“ soll verdeutlichen, dass diese Reaktion im Wasser sehr selten abläuft (nur 2 Wassermoleküle von 10 Millionen nehmen gleichzeitig an der Reaktion teil - es entstehen ein H₃O⁺ und ein OH⁻ -Ion).</p> <p>Mit einem Klick auf die Taste „Pause“ kann die Simulation an beliebiger Stelle angehalten werden.</p> | | |
| | | Reaktionslupe: Autoprotolyse |

Die gleiche Reaktion (Autoprotolyse) - nun mit zusätzlicher Darstellung der freien Elektronenpaare (Lone Pair – Darstellung: Ein)

| | | |
|-------------------|----------|---------------------------------|
| | | |
| Ausgangssituation | Reaktion | Produkte - sie reagieren zurück |

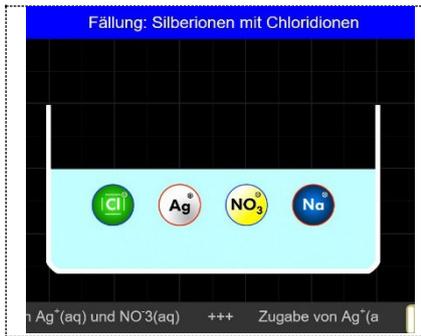
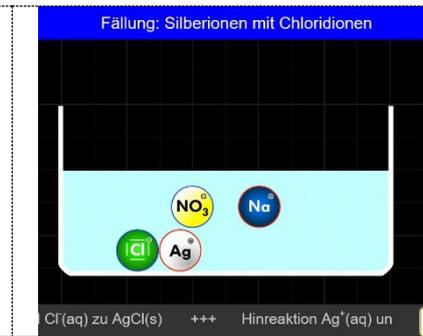
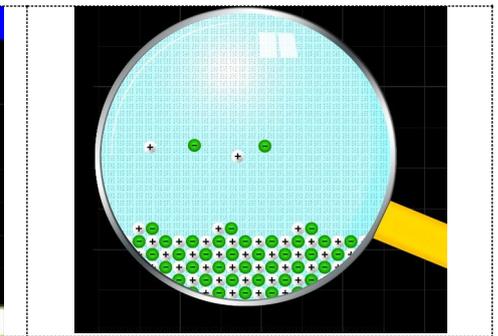
Starke Säure mit starker Base: HCl mit NaOH - Neutralisation

Am Beispiel dieser Neutralisation wird zuerst das Vorhandensein der Oxonium- und der Chloridionen in einer Salzsäurelösung gezeigt. Durch die Zugabe von Natronlauge kommen Natrium- und Hydroxidionen hinzu. Es kommt zur Protolysereaktion, bei der in der Simulation ein weiteres Wassermolekül entsteht. Letztlich verbleiben als Ionen nur Natrium- und Chloridionen in der Lösung. Es gibt keine Rückreaktion.

| | | |
|-------------------|-----------------------|--|
| | | |
| Ausgangssituation | Produkte der Reaktion | Die Wassermoleküle verschwinden in dem umgebenden Wasser |

Fällung von AgCl mit AgNO₃ und NaCl

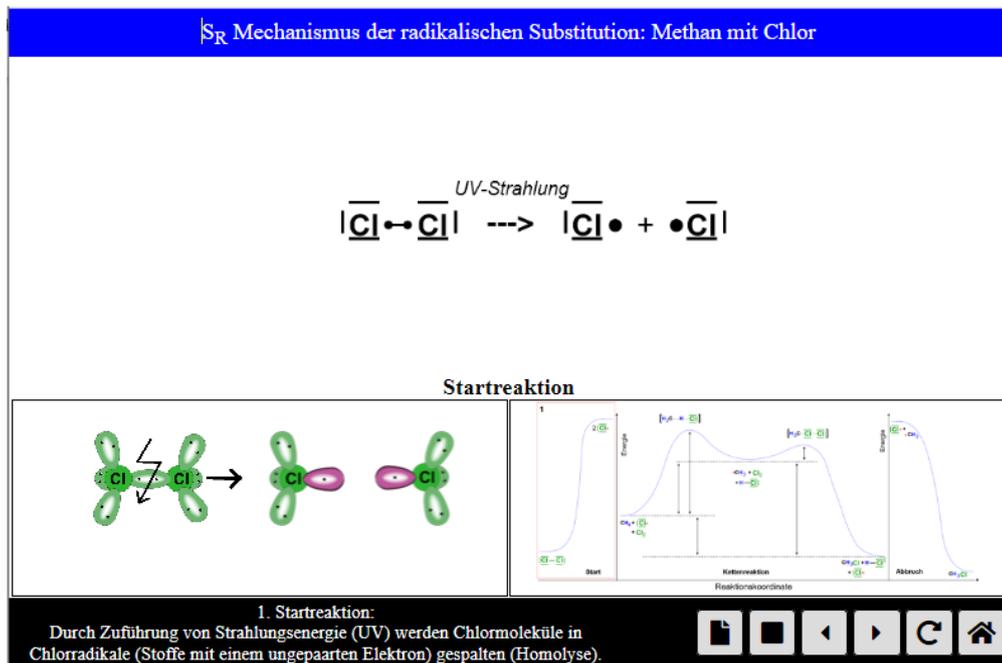
Es werden zunächst bei der Simulation ein Natrium- und ein Chlorid-Ion vorgegeben. Nach der Zugabe eines Silber- und eines Nitrat-Ions kommt es zur Ausfällung von Silberchlorid. Das Natrium- und das Nitrat-Ion bleiben hydratisiert in der Lösung zurück. Aber auch hier gibt es eine Rückreaktion: Die Animation läuft weiter.

| | | |
|---|--|---|
|  |  |  |
| Ausgangssituation | Bodenkörper hat sich abgesetzt | Gleichgewicht durch die "Reaktionslupe" |

Ein Klick auf „Lupe“ zeigt beim Lösegleichgewicht, dass vom Bodenkörper Silberchlorid nur sehr wenige Ionen in Lösung gehen, und die Ionen in Lösung auch wieder festes Silberchlorid bilden.

Reaktionsmechanismen

Das Grundschema ist für alle Animationen der Mechanismen gleich:



Unter der Überschrift ist das Hauptfenster, in dem die **Reaktionsmechanismen so gezeichnet sind, wie die Schüler sie auch wiedergeben** sollen.

Darunter links sind „räumliche“ Bilder oder Elektronendichtedarstellungen, die den jeweiligen Schritt verdeutlichen sollen. Rechts daneben ist das Energiediagramm der Reaktion mit dem jeweiligen Schritt.

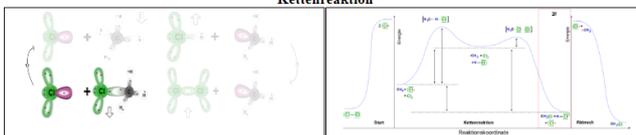
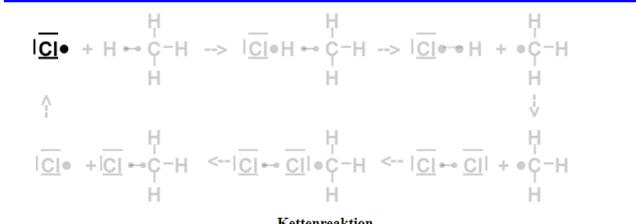
- | | | | |
|--|--|--|------------------------|
| | Ein-Ausblenden der Beschreibung (Fußzeile) | | Sprung ganz nach vorne |
| | Weiter | | Ein Schritt zurück |
| | Wiederholung der Szene | | Zum Animationsmenü |

Vergessen Sie nicht, auf das Symbol für „weiter“ zu drücken.

Radikalische Substitution (Methan mit Chlor)

Die Startreaktion ist schon auf der vorigen Seite abgebildet:

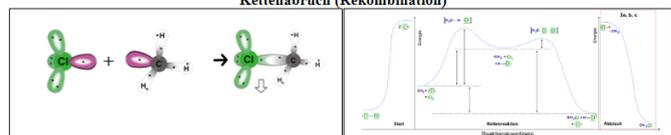
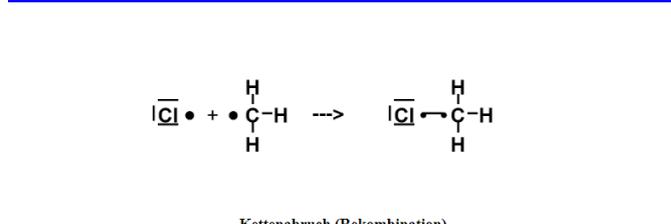
S_R Mechanismus der radikalischen Substitution: Methan mit Chlor



2f. So entsteht Monochlormethan und ein Chlorradikal. Dieses kann oben wieder weiter reagieren.

Kettenreaktion

S_R Mechanismus der radikalischen Substitution: Methan mit Chlor

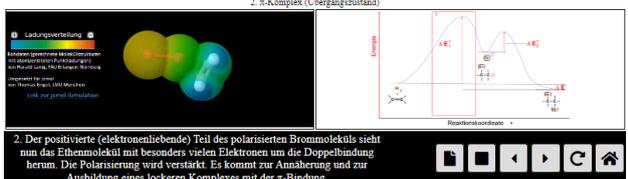
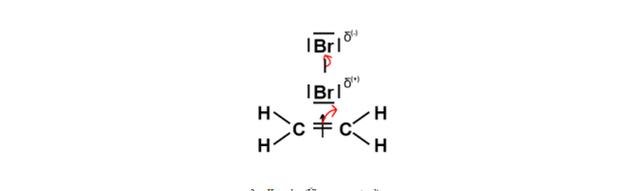


eine der Kettenabbruchreaktionen

Elektrophile Addition (Ethen mit Brom)

Die Animation zeigt die elektrophile Addition von Brom an Ethen. Dazu werden Der Energieverlauf während der Reaktion und die Ladungsverteilung in den Teilchen dargestellt.

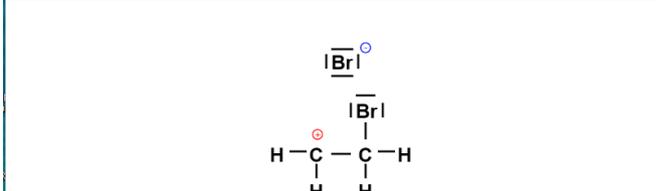
A₂ Elektrophile Addition von Halogenen an C-C Mehrfachbindung



2. Der positiverte (elektronenliebende) Teil des polarisierten Brommoleküls sieht nun das Ethenmolekül mit besonders vielen Elektronen um die Doppelbindung herum. Die Polarisierung wird verstärkt. Es kommt zur Annäherung und zur Ausbildung eines lockeren Komplexes mit der π -Bindung.

Elektrophiler Angriff

A₂ Elektrophile Addition von Halogenen an C-C Mehrfachbindung



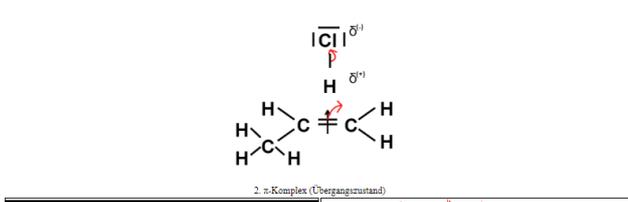
3.2 Aus diesem cyclischen Bromoniumion kann sich leicht in eines der beiden positiv geladenen Carbeniumionen bilden.

Entstehung des Kations

Additionsreaktion von Chlorwasserstoff und Propen.

.. verläuft analog

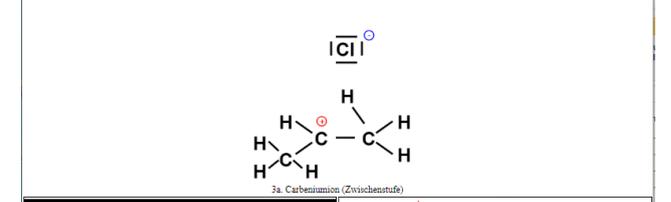
A₂ Elektrophile Addition von Halogenwasserstoff an C-C Mehrfachbindung



2. Das positiverte (elektronenliebende) Wasserstoffatom sieht nun das Propen mit besonders vielen Elektronen um die Doppelbindung herum. Die Polarisierung wird verstärkt. Es kommt zur Annäherung und zur Ausbildung eines lockeren Komplexes mit der π -Bindung.

Elektrophiler Angriff

A₂ Elektrophile Addition von Halogenwasserstoff an C-C Mehrfachbindung

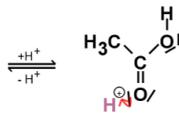


3a. Nun zieht das Chloratom, das Bindungselektronenpaar ganz zu sich hin (Heterolyse). Es entsteht ein Chloridion. Gleichzeitig bildet sich eine Bindung zwischen dem Wasserstoffatom und einem Kohlenstoffatom der Doppelbindung aus. Es entsteht ein Carbeniumion.

Entstehung des Kations

Veresterung: Nucleophile Additionsreaktion

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung

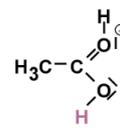


1. Protonierung der Carbonsäure (Beispiel Essigsäure) durch eine Säure

1 Die Schwefelsäure reagiert als Protonendonator und protoniert die Essigsäure an der elektronegativen Stelle, dem Carbonyl-Sauerstoff. Es entsteht ein Carbeniumion.

Protonierung der Carbonyl-Gruppe

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung

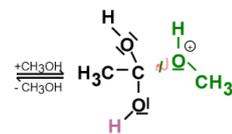


2a. Mesomere Formeln

Das entstandene Carbeniumion lässt sich in drei verschiedenen mesomeren Formen mit dann zum Teil auch positiven Sauerstoffatomen beschreiben.

Bildung der mesomeren Grenzstrukturen

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung

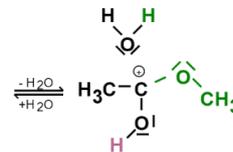


2b. Addition des Alkohols (hier: Methanol) an das Carbeniumion

An das entstandene Carbeniumion greift ein freies Elektronenpaar des Alkoholsauerstoffs nucleophil an und bildet eine Bindung. Durch die Addition wird das Alkoholsauerstoffatom positiv geladen.

Angriff des freien EPs des Alkohols

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung

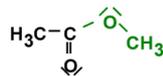


4. Abspaltung von Wasser

Nun spaltet sich Wasser vom Molekül ab. Wasser ist ein sehr stabiles Molekül. Das ist energetisch günstig. Es entsteht ein Carbeniumion.

Umlagerung des Protons und Abspaltung von Wasser

A_N Nucleophile Addition an Carbonyl-C=O :Veresterung



6. Ein Estermolekül (Essigsäuremethylester) ist entstanden

Alle Teilschritte dieses Mechanismus sind reversible Reaktionen. Daher ist es auch möglich, einen Ester säurekatalysiert in einen Alkohol und eine Carbonsäure zu spalten (Verseifung). Benutzt man Schwefelsäure als Katalysator wird durch diese das entstehende Wasser gebunden und die Veresterungsreaktion bevorzugt.

Abspaltung des Protons

Alle Schritte sind reversibel