



Kerschis zur Uni ...



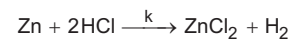
Fächer- und jahrgangsstufenübergreifender Unterricht in der Arbeitsgemeinschaft "Chemie & Mathematik" am naturwissenschaftlich-technischen Gymnasium (NTG) der Kerschensteinerschule Stuttgart im Schuljahr 07/08.

Reaktionskinetik

Wir wollen den zeitlichen Verlauf chemischer Reaktionen untersuchen und mit Hilfe mathematischer Methoden modellieren.

Aufgabenstellung:

Ein Reagenzglas wird mit verdünnter HCl gefüllt. Nach Zugabe elementaren Zinks wird das Reagenzglas verschlossen und der entstandene Wasserstoff aufgefangen. Zu verschiedenen Zeiten werden die Gasvolumina ermittelt und die HCl-Gehalte titrimetrisch bestimmt.



Die HCl-Konzentration c wird als Funktion der Zeit in einem Diagramm dargestellt. Mit Hilfe dieses Schaubilds soll der Funktionsterm $c(t)$ gefunden werden.

Procedere:

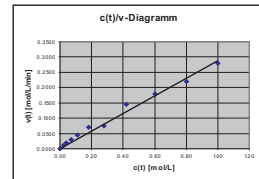
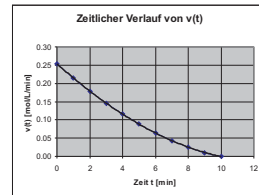
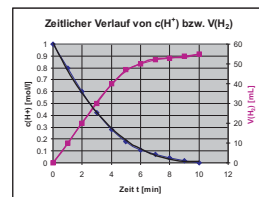
- Die momentane Änderung von $c(t)$ wird als Reaktionsgeschwindigkeit $|v(t)|$ interpretiert.
- $v(t)$ wird ermittelt als Steigung der Tangenten an den Graph von $c(t)$ und in einem Diagramm dargestellt.
- Um den Zusammenhang zwischen $v(t)$ und $c(t)$ zu erfassen, werden die Funktionen verkettet. Das $c(t)$ - $v(t)$ -Diagramm ist eine Ursprungsgerade. Es gilt also: $v(t) = k \cdot c(t)$.
- Mit $|v(t)| = \frac{dc(t)}{dt} = c'(t)$ erhält man $c'(t) = k \cdot c(t)$.
- Die Lösung dieser Differenzialgleichung (DGL) ist $c(t) = c(0) \cdot e^{-kt}$

Verallgemeinerung:

Für alle Reaktionen kann der Zusammenhang zwischen Reaktionsgeschwindigkeit und Konzentration mit einer DGL folgendermaßen dargestellt werden:

$$\frac{dc(t)}{dt} = -k \cdot c^n(t)$$

n = Reaktionsordnung
 k = Geschwindigkeitskonstante



Ergebnis:

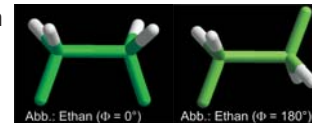
$c(t) = c(0) \cdot e^{-kt}$
dabei ist:
 $c(0)$ = Anfangskonzentration
= 1 mol/L
 k = Geschwindigkeitskonstante
= 0,28 min⁻¹

Molecular Modeling

Wir wollen unseren Kerschis Einblicke in moderne Forschungsgebiete der Theoretischen Chemie geben. Das Molecular Modeling ("Chemie am Computer") liefert wertvolle Informationen, so z. B. bei

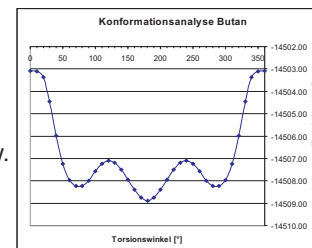
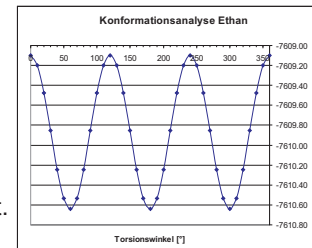
- der Visualisierung von Strukturen,
- der Interpretation experimenteller Daten (z. B. IR-Spektren),
- der Erforschung von Effekten mit Hilfe von Modellen

Mit einem Molecular-Modeling-Programm [1] führen wir **Konformationsanalysen** einfacher Kohlenwasserstoffe durch.



Procedere:

- Das zu untersuchende Moleküle (z.B. Ethan) wird mit dem Grafiktool gezeichnet und geometrioptimiert (semiempirische Methode PM3).
- Der Torsionswinkel Φ (H-C-C-H-Winkel) wird variiert (0° bis 360°) und die jeweilige single-point-Energie berechnet.
- Die Energiebarriere für eine Rotation um die C-C-Achse ergibt sich näherungsweise aus der Energiedifferenz zwischen der Minimum- und Maximumstruktur.
- Zur Verfeinerung werden die Energien der geometrioptimierten Minimum- bzw. Maximumstrukturen ab-initio (3-21G-Basisatz) berechnet.



Tab. 1: Rotationsbarriere um die C-C-Achse im Ethan

Single-Point-Energie: 6,2 kJ/mol
ab-initio-Energie: 11,5 kJ/mol
Experimenteller Wert: 12,1 kJ/mol

Tab. 2: Rotationsbarriere ($E(\phi=0^\circ)$ - $E(\phi=180^\circ)$) um die zentrale C-C-Achse im Butan

Single-Point-Energie: 24,2 kJ/mol
ab-initio-Energie: 25,3 kJ/mol
Experimenteller Wert: 27,0 kJ/mol

[1] HyperChem 7.0 (30 Tage lauffähige Trial-Version), Tools for Molecular Modeling, Hypercube, Inc., 2002

Zustandsgrößen

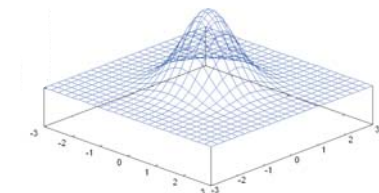
Wir wollen funktionale Zusammenhänge mit mehr als einer Variablen mathematisch erfassen.

Aufgabenstellung:

Ausgehend von der allgemeinen Gasgleichung ($p \cdot V = n \cdot R \cdot T$) wollen wir die momentane Änderung $dV(p, T)$ berechnen.

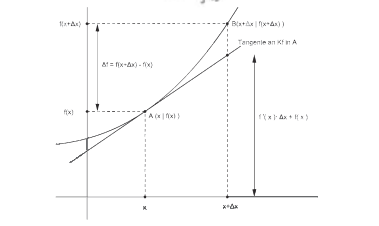
Procedere:

Wir erweitern den Funktionsbegriff: $(x_1, x_2) \rightarrow f(x_1, x_2)$
 $\in D \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \in \mathbb{R}$
Wir stellen Funktionen mit zwei Variablen in einem 3D-Plott als "Funktionsgebirge" dar.



Wir erweitern den Ableitungsbegriff:

- Partielle Ableitung: $\frac{\partial}{\partial x_1} f(x_1, x_2) \Big|_{x_2 = \text{konst.}}$
- Das Differenzial:
 $df = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} f'(x) \cdot \Delta x = f'(x) \cdot dx$



- Das totale Differenzial:
Bei Funktionen mit zwei Variablen ist das totale Differenzial die Summe der partiellen Ableitungen:
 $df = \sum_{i=1}^2 \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i$
- Die zweiten Ableitungen:
 $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}, \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$

Ergebnis:

$$dV_m(p, T) = \frac{\partial V}{\partial T} dT + \frac{\partial V}{\partial p} dp$$

mit $V_m = \frac{RT}{p}$ folgt:

$$dV_m(p, T) = \frac{1}{p} \cdot (R \cdot dT - V \cdot dp)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial T \partial p} = \frac{\partial^2 V}{\partial p \partial T} = -\frac{R}{p^2}$$

Da die gemischten Ableitungen gleich sind, ist V eine Zustandsfunktion der Zustandsgrößen p und T (Satz von Schwarz)

Kontakt:
Brigitte Rentschler, Dr. Bernd Regelmann

Kerschensteinerschule Stuttgart
Steiermärker Str. 72
70469 Stuttgart

Telefon: 0711 / 13 54 96
Telefax: 0711 / 13 54 970
www.kerschensteinerschule.de