

Verlag workshop 2 november 2018

Opzet

- Achtergrond activeringsenergie en Formule Arrhenius
- Uitleg simulatie en uitgebreid oefenen
- Slotconclusies
- Afronding (2 voorbeelden van 'missers')

Zie de 2 powerpoints van de workshop zijn hier bijgevoegd

Verlag workshop 2 november

Achtergrond

Bespreking van het fysische model: verdelingsevenwicht.

Belangrijk daarbij is het feit dat als deeltjes van de ene fase naar de andere gaan, door het grensvlak heen, het in de ene richting energie kost en in de teruggaande richting energie oplevert.

Er is een minimale energie vereist (activeringsenergie E_a) om de gebonden oplosmiddelmoleculen in de ene fase los te breken; eenmaal door het grensvlak heen worden er weer nieuwe vloeistofmoleculen gebonden en komt er energie vrij.

Toelichting dia's : 1 t/m 8 van 'Arrhenius in het zonnetje gezet'

Verlag workshop 2 november

De formule van Arrhenius koppelt de activeringsenergie aan een reactiesnelheidsconstante.

Hoe groter de activeringsenergie hoe kleiner de constante.

Het proces van heen- en teruggaande reactie wordt bepaald door de twee constanten k_{heen} en k_{terug} .

Op basis hiervan heb ik een simulatie ontworpen die dit proces van kriskras-bewegende deeltjes laat zien.

Toelichting dia's : 1 t/m 8 van 'Arrhenius in het zonnetje gezet'

Uitleg simulatie

- In de computersimulatie bewegen 1000 deeltjes kriskras door de twee ruimtes heen; de poortjes laten de deeltjes alleen in één richting door.
- De breedtes van de poortjes beheersen het hele proces; er blijkt uiteindelijk een evenwicht te ontstaan.
- De deelnemers konden zo diverse belangrijke aspecten van een (chemisch) evenwicht nabootsen.

Ervaringen

- Het gebruik van de simulatie gaf geen problemen; iedereen kon er al gauw mee overweg.
- Door te experimenteren met de startwaarden en de grootte van de poortjes ontdekte men al snel de diverse kenmerken van evenwichten: er ontstond een fluctuerend evenwicht.

De deelnemers waren enthousiast en zagen goede mogelijkheden voor gebruik in de klas!

Toelichting dia's : 9 t/m 18 van 'Arrhenius in het zonnetje gezet'

Activeringsenergie en poortje

- De activeringsenergie E_a bepaalt uiteindelijk de kans van de deeltjes met genoeg energie om de andere fase te bereiken.
- De breedte van een poortje is evenredig met de kans voor een deeltje om de andere ruimte te bereiken.
- Door deze 1-op-1 relatie is het kriskrasmodel een goede manier om het verdelingsevenwicht te simuleren.

Toelichting dia's : 16 t/m 18 van 'Arrhenius in het zonnetje gezet'

Kwantitatieve experimenten

Voor een kwantitatieve benadering heb ik verwezen naar de 2^e powerpointpresentatie: 'Intermezzo'. Deze geeft een beschrijving van experimenten waarbij op basis van het simulatiemodel de reactiesnelheidsconstanten k_{heen} en k_{terug} met een spreadsheet bepaald kunnen worden.

- De theoretische formule voor het verloop geeft een goede ondersteuning van de 'experimentele resultaten'.
- Zie de resultaten van de experimenten in de powerpoint van het het kriskrasmodel

Toelichting dia's : 19 t/m 22 van 'Arrhenius in het zonnetje gezet'

Afleiding K_{ev} en conclusies

- De workshop werd afgerond met een afleiding van het verband tussen de twee reactiesnelheidsconstanten en de evenwichtsconstante.
- De verhouding van de k -waarden resulteert in een formule waarbij het verschil in activeringsenergie van beide reacties voorkomt.
- Dit verschil is per definitie gelijk aan de reactiewarmte (ΔH), die gerelateerd kan worden aan de thermodynamische evenwichtsconstante.

Toelichting dia's : 23 t/m 25 van 'Arrhenius in het zonnetje gezet'

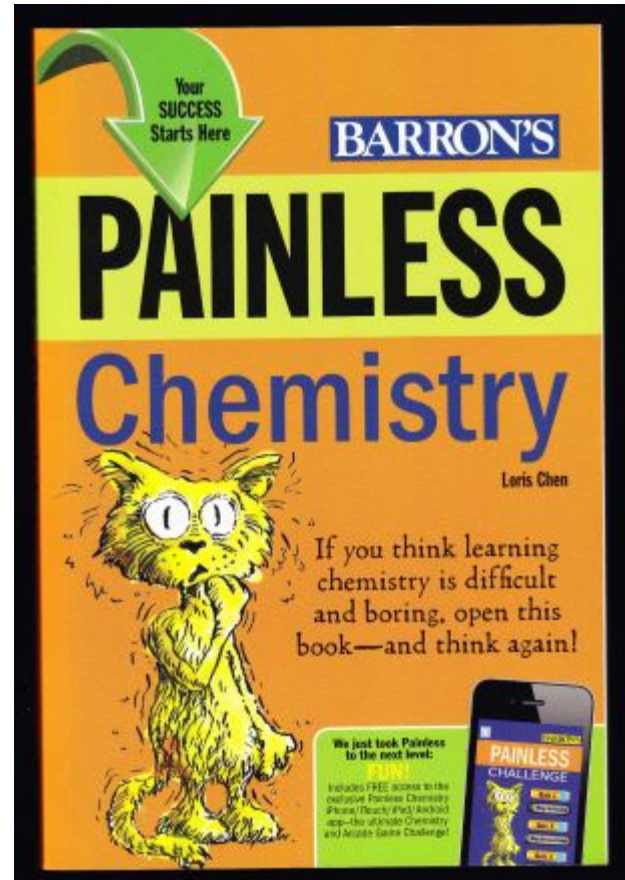
Twee missers

In dit boek staat een stukje over evenwichten.

Je ziet het op de volgende dia.

Geef commentaar bij de uitleg over het bereiken van evenwicht.

Geef in de grafiek het punt aan waar volgens jou evenwicht is.



Eerste misser

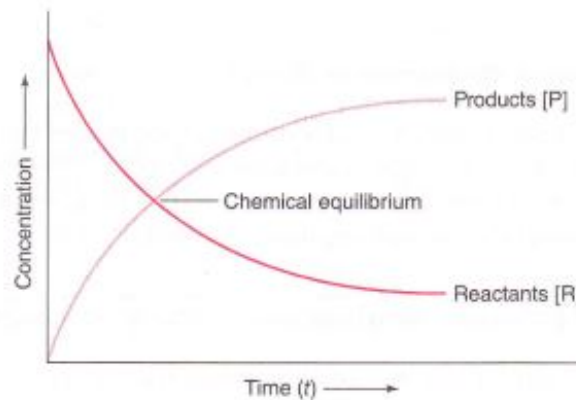


Figure 7-1. Chemical equilibrium

When a chemical reaction begins, the product concentration is zero. The concentration of the reactants will begin to decrease and the concentration of the products will begin to increase.

At some point in the reaction, the concentration of the reactants will equal the concentration of the products. This is called the **chemical equilibrium** point. Some reactions may become stuck at the equilibrium point. Other reactions will continue until all the reactants have been changed into products.

Tweede misser

Evenwicht

In een evenwichtsreactie geldt hetzelfde: de activeringsenergie van de teruggaande reactie is de hoogte van dezelfde energieberg maar dan gezien vanaf de andere kant. Deze energie levert via dezelfde Arrheniusvergelijking een andere reactiesnelheid k op. Wanneer het evenwicht is bereikt dan geldt dat de twee reactiesnelheden gelijk zijn. Hieruit kan de evenwichtsconstante K_{ev} worden afgeleid:

$$\begin{aligned}k_1 &= k_2 \\A_1 e^{\frac{-E_{a1}}{RT}} &= A_2 e^{\frac{-E_{a2}}{RT}} \\ \frac{A_2}{A_1} &= e^{\frac{E_{a1}-E_{a2}}{RT}} = e^{\frac{\Delta E}{RT}} = K_{ev}\end{aligned}$$

Het is belangrijk te zien dat in deze vergelijking de activeringsenergie is weggefallen! Daardoor is het eenvoudig in te zien dat een katalysator de ligging van een evenwicht niet kan veranderen.

Tweede misser

- In Wikipedia (NL) staat een uitleg/afleiding over het bereiken van evenwicht. Daarbij wordt ook gebruik gemaakt van een vergelijkbaar eenvoudig evenwicht zoals ons verdelingsevenwicht.
- Welke twee begrippen worden hier duidelijk door elkaar gehaald?
- Geef een correcte afleiding met de juiste formule voor *reactiesnelheid*.

En dan nog.....

- Om zelf met de programma's van deze workshop aan de slag te gaan : stuur een e-mail naar **aba.vandenberg@gmail.com**
- De programma files zijn zgn. JAR files en daarvoor moet je op je computer kunnen beschikken over JAVA (runtime), dat vaak al wel geïnstalleerd is als onderdeel van Windows.