

Nola gertatzen dira erreazio kimikoak? Erreakzio kimikoen mekanismoak

Helburua

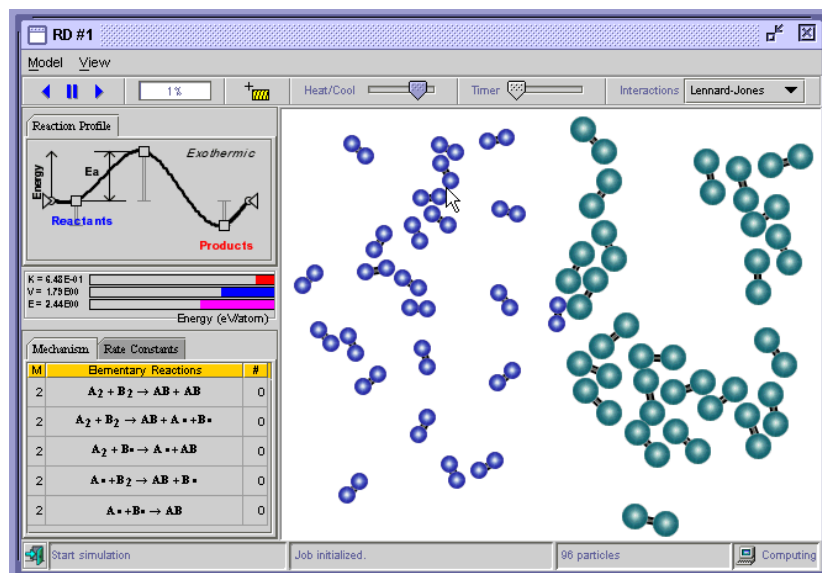
- Erreakzio kimiko batetan loturekin zer gertatzen den ulertu (hau da, zein loturak apurtzen diren eta zeintzuk sortu identifikatzen jakin)

Aurretik jakin beharreko kontzeptuak

- Lotura kobalentea
- Energia zinetikoa

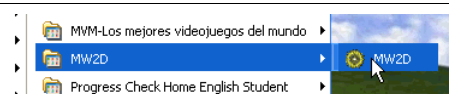
Erabiliko diren baliabideak

- "Molecular Workbench" izeneko softwarea erabiliko dugu. Hona hemen bere irudi bat:

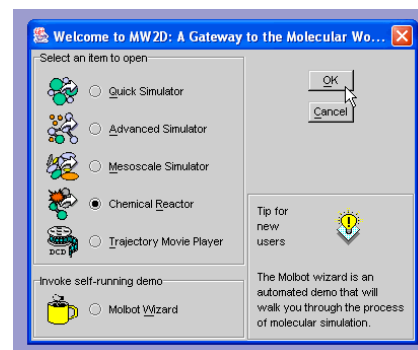


- Hona hemen erabiliko diren prozedurak:

Programa martxan jartzeko: Inicio – Programas – MW2D prozedura aukeratu.



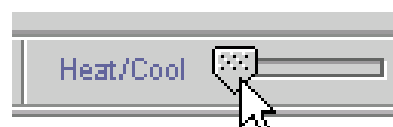
"Chemical Reactor" aukera hartu. Jarraian, OK sakatu



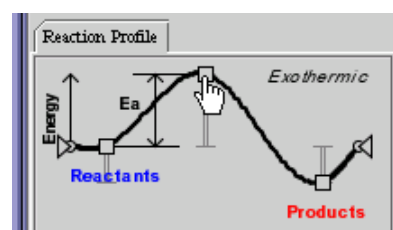
Hemen agertzen diren botoiak, simulazioak erabiltzeko (geratzeko, martxan jartzeko...) dira.



Tresna honen bidez, erreazio-ontziaren tenperatura kontrolatzen da.



Azkenik, hemendik kontrolatzen da molekulen arteko talkak zenbateko energia behar duen loturak apurtzeko eta erreazio kimikoa sortzeko.



Edukien garapena

AKTIBITATEA. Erreakzioa martxan jarri.

Hasieran, simulazioa martxan jarri, aldagaiak aldatu gabe.

GALDERAK:

- Mugitzen diren molekulek, nolako higidura dute? Ba al dute traslazio-higidurarik? Eta errotazio-higidurarik? Eta birazio-higidurarik?
- Hasieran ematen diren talka gehienak, eraginkorrak al dira? (Hau da, molekulen izaera aldatzen al dute?)

AKTIBITATEA. Ontziaren tenperatura handituz.

Oraingoan, ontziaren tenperatura aldatu, horretarako "Heat/Cool" tresna erabiliz.

GALDERAK:

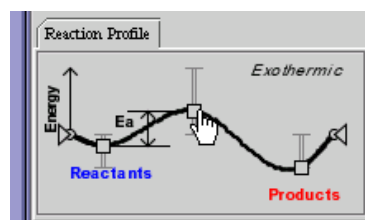
- Zer gertatzen da molekulen higidurarekin tenperatura handitzean?
- Molekulen arteko talkak berdinak al dira?

AKTIBITATEA. Aktibazio-energia aldatuz.

Azkenik, talkaren eraginkortasuna aldatuko dugu. Hau da, energia gutxiagoz eginiko talka erreakzioa emateko gai izatea erabakiko dugu (hori da katalizatzailearekin lortzen dena).

GALDERA:

- Azkarrago ematen al da erreakzioa?



AKTIBITATEA. Apurtutako eta sortutako loturak identifikatzen.

Eman dezagun $A_2 + B_2 \rightarrow 2 AB$ erreakzio kimikoa aztertzen ari garel.

- Zeintzuk dira erreakzio hori emateko apurtu behar diren loturak?
- Zeintzuk dira azkenik agertzen diren loturak?

ARIKETAK. Apurtutako eta sortutako loturak identifikatzen

Ondoko erreakzio kimikoetan, idatzi molekulen Lewis-en egiturak eta identifikatu zeintzuk loturak apurtzen diren eta zeintzuk sortzen diren:

- $2 \text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O}$
- $\text{N}_2 + 3 \text{H}_2 \rightarrow 2 \text{NH}_3$
- $\text{H}_2 + \text{Cl}_2 \rightarrow 2 \text{HCl}$
- $2 \text{HCl} \rightarrow \text{H}_2 + \text{Cl}_2$
- $\text{CH}_4 + 2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$