

Chemische Reaktionen mit dem Energiekonzept quantitativ verknüpfen

Mit der Veröffentlichung der „Mathematisch-naturwissenschaftlichen Formelsammlung“ ergeben sich Änderungen einiger bisher üblicher Größensymbole bzw. -bezeichnungen. Diese Änderungen haben zum einen Auswirkungen auf den Unterricht und zum anderen auf die Formulierungen in Aufgaben in Leistungserhebungen.

Im Folgenden finden Sie Anregungen zur Umsetzung der Anforderungen in der Kalorimetrie (praktische Ermittlung) sowie der Berechnung der Änderung der Enthalpie (theoretische Ermittlung). Abschließend werden Möglichkeiten der grafischen Darstellung des energetischen Verlaufs von Reaktionen gegeben. Eine entsprechende Vorlage (pptx-Datei) finden Sie auf dem Bildungsserver zum Download.

Rückmeldungen, Hinweise, Anregungen und Vorschläge zur Weiterentwicklung der Aufgabe senden Sie bitte an matthias.poetter@sachsen-anhalt.de.

Die nachfolgenden Beispiele zeigen neben knappen Erläuterungen Arbeitsaufträge und die Erwartungen, die an die Lernenden gestellt werden. Sie sollen, wie die niveaubestimmenden Aufgaben, zur Reflexion und Weiterentwicklung des eigenen Unterrichts anregen.

Kalorimetrie

Bei kalorimetrischen Untersuchungen wird aus der Änderung der Temperatur der Kalorimeterflüssigkeit (ΔT mit $\Delta T = \vartheta_{\text{Ende}} - \vartheta_{\text{Anfang}}$) auf die von der Kalorimeterflüssigkeit aufgenommene Wärme Q (siehe Abb. 1) geschlossen. Der Rückschluss auf den energetischen Verlauf der eigentlichen Reaktion ist entscheidend:

Steigt die Temperatur der Kalorimeterflüssigkeit, d. h. nimmt die Kalorimeterflüssigkeit Energie auf, muss diese bei der eigentlichen Reaktion abgegeben werden. Analog verhält es sich beim Sinken der Temperatur der Kalorimeterflüssigkeit. Es gilt: $\Delta H = -Q$.

Kalorimetrie

Im geschlossenen System gilt bei konstantem Druck unter Vernachlässigung der Temperaturänderung des Kalorimeters:

$$Q = c \cdot m \cdot \Delta T$$

Q : Wärme;
 c : spezifische Wärmekapazität der Kalorimeterflüssigkeit;
 m : Masse der Kalorimeterflüssigkeit;
 ΔT : Änderung der Temperatur der Kalorimeterflüssigkeit

Enthalpie bezogen auf 1 mol der Teilchen X:

$$\Delta_r H = -\frac{Q}{n(X)}$$

$\Delta_r H$: Reaktionsenthalpie;
 Q : Wärme;
 $n(X)$: umgesetzte Stoffmenge der Teilchen X

Abb. 1: Auszug aus der „Mathematisch-naturwissenschaftlichen Formelsammlung“

Ein Vergleichen von Enthalpieänderungen aufgrund von kalorimetrischen Untersuchungen ist schwierig. Eine Normierung der Änderung der Enthalpie (ΔH) pro umgesetzter Stoffmenge der Teilchen X ($n(X)$) liefert die Reaktionsenthalpie ($\Delta_r H$). Mithilfe der Reaktionsenthalpie lassen sich Reaktionen unter energetischer Sicht zuverlässig vergleichen.

Je nach Sachzusammenhang können die zu berechnenden Größen variieren.

Beispiel 1:

In einem Kalorimeter, das mit Wasser der Masse $m = 900 \text{ g}$ befüllt ist, werden $1,8 \text{ g}$ Phenol vollständig verbrannt. Die Anfangstemperatur des Wassers beträgt $\vartheta_{\text{Anfang}} = 18,9^\circ\text{C}$ und die Endtemperatur beträgt $\vartheta_{\text{Ende}} = 30,4^\circ\text{C}$.

Berechnen Sie die Reaktionsenthalpie für die Verbrennung von 1 mol Phenol.

Variante 1:

1. Berechnung der von der Kalorimeterflüssigkeit aufgenommenen/abgegebenen Wärme

$$\begin{aligned} Q &= c \cdot m \cdot \Delta T \\ &= 4,183 \frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \cdot 0,9 \text{ kg} \cdot (30,4 - 18,9) \text{ K} \\ &\approx 43,3 \text{ kJ} \end{aligned}$$

Interpretation (fakultativ):

Bei der Verbrennung von $1,8 \text{ g}$ Phenol werden von der Kalorimeterflüssigkeit (Wasser) $43,3 \text{ kJ}$ aufgenommen, d. h. bei der Reaktion werden $43,3 \text{ kJ}$ abgegeben.

2. Berechnung der eingesetzten Stoffmenge

$$\begin{aligned} n(\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}) &= \frac{m(\text{C}_6\text{H}_5\text{OH})}{M(\text{C}_6\text{H}_5\text{OH})} \\ &= \frac{1,8 \text{ g}}{94 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \\ &\approx 0,019 \text{ mol} \end{aligned}$$

3. Berechnung der Reaktionsenthalpie

$$\begin{aligned} \Delta_r H &= \frac{-Q}{n(\text{C}_6\text{H}_5\text{OH})} \\ &\approx -2279 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \end{aligned}$$

Variante 2:

$$\begin{aligned} \Delta_r H &= \frac{-c \cdot m \cdot \Delta T}{n(\text{C}_6\text{H}_5\text{OH})} \\ &= \frac{-4,183 \frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \cdot 0,9 \text{ kg} \cdot (30,4 - 18,9) \text{ K}}{0,019 \text{ mol}} \\ &\approx -2279 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \end{aligned}$$

Hinweis:

Die Gleichung muss von den Lernenden selbstständig aus den in der „Mathematisch-naturwissenschaftlichen Formelsammlung“ gegebenen Gleichungen entwickelt werden.

Variationsmöglichkeiten:

- Berechnen Sie die Wärme Q , die näherungsweise beim vollständigen Verbrennen von $1,8 \text{ g}$ Phenol entwickelt werden kann. ($Q \approx 43,3 \text{ kJ}$)
- Leiten Sie aus der kalorimetrischen Untersuchung die Änderung der Enthalpie bei der vollständigen Verbrennung von 2 mol Phenol ab. $\left(\Delta H \approx -4558 \text{ kJ über } \frac{\Delta H}{-43,3 \text{ kJ}} = \frac{2 \text{ mol}}{0,019 \text{ mol}} \right)$

Beispiel 2:

Beim Lösen von 5,13 g Kaliumnitrat (KNO_3) in 100 g Wasser ist eine Temperatursenkung von 4 K festzustellen.

Berechnen Sie die Lösungsenthalpie $\Delta_L H$ (entspricht der Reaktionsenthalpie, wenn es sich um das Auflösen eines Stoffes handelt) für Kaliumnitrat.

Variante 1:

1. Berechnung der von der Kalorimeterflüssigkeit aufgenommenen/abgegebenen Wärme

$$\begin{aligned} Q &= c \cdot m \cdot \Delta T \\ &= 4,183 \frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \cdot 0,1 \text{ kg} \cdot (-4) \text{ K} \\ &\approx -1,67 \text{ kJ} \end{aligned}$$

Interpretation (fakultativ):

Beim Lösen von 5,13 g Kaliumnitrat werden von der Kalorimeterflüssigkeit (Wasser) 1,67 kJ abgegeben, d. h. bei der Reaktion werden 1,67 kJ aufgenommen.

2. Berechnung der eingesetzten Stoffmenge

$$\begin{aligned} n(\text{KNO}_3) &= \frac{m(\text{KNO}_3)}{M(\text{KNO}_3)} \\ &= \frac{5,13 \text{ g}}{101 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \\ &\approx 0,05 \text{ mol} \end{aligned}$$

3. Berechnung der Lösungsenthalpie

$$\begin{aligned} \Delta_L H &= \frac{-Q}{n(\text{KNO}_3)} \\ &\approx 33,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \end{aligned}$$

Variante 2:

$$\begin{aligned} \Delta_L H &= \frac{-c \cdot m \cdot \Delta T}{n(\text{KNO}_3)} \\ &= \frac{-4,183 \frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \cdot 0,1 \text{ kg} \cdot (-4) \text{ K}}{0,05 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \\ &\approx 33,5 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \end{aligned}$$

Berechnung der Änderung der Enthalpie

Durch die Berechnung der Änderung der Enthalpie (vgl. Abb. 2) ergibt sich durch die Multiplikation der Stoffmengen mit den Standardbildungsenthalpien die Einheit kJ. Die errechnete Änderung der Enthalpie bezieht sich direkt auf den Stoffmengenumsatz entsprechend der Reaktionsgleichung, sodass sich weitere Überlegungen (z. B. das Berechnen der abgegebenen Energie bei gegebener Masse eines brennbaren Stoffes) über Verhältnisgleichungen anstellen lassen können. Vorteilhaft ist der Wegfall der Einheit $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$, die die Berechnung der molaren Standardreaktionsenthalpie nach sich zog. Dadurch entfällt die Berücksichtigung des Formelumsatzes, die bei entsprechenden Reaktionen (z. B. die vollständige Verbrennung von Butan) zu Problemen bei der Interpretation der Einheit führen konnte.

Änderung der Enthalpie

Für eine allgemeine Reaktion $aA + bB \rightarrow cC + dD$ bei $T = 298,15\text{K}$ und $p = 101,325\text{kPa}$ gilt:

$$\Delta H = \left[n_c \cdot \Delta_f H^\circ (C) + n_d \cdot \Delta_f H^\circ (D) \right] - \left[n_a \cdot \Delta_f H^\circ (A) + n_b \cdot \Delta_f H^\circ (B) \right]$$

ΔH : Änderung der Enthalpie;
 $\Delta_f H^\circ$: Standardbildungsenthalpie;
 n_a, n_b, n_c, n_d : Stoffmengen im stöchiometrischen Verhältnis

Änderung der Entropie

Für eine allgemeine Reaktion $aA + bB \rightarrow cC + dD$ bei $T = 298,15\text{K}$ und $p = 101,325\text{kPa}$ gilt:

$$\Delta S = \left[n_c \cdot S^\circ (C) + n_d \cdot S^\circ (D) \right] - \left[n_a \cdot S^\circ (A) + n_b \cdot S^\circ (B) \right]$$

ΔS : Änderung der Entropie;
 S° : Standardentropie;
 n_a, n_b, n_c, n_d : Stoffmengen im stöchiometrischen Verhältnis

Gibbs-Helmholtz-Gleichung

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

ΔG : Änderung der freien Enthalpie;
 ΔH : Änderung der Enthalpie;
 T : Temperatur;
 ΔS : Änderung der Entropie

Abb. 2: Auszug aus der „Mathematisch-naturwissenschaftlichen Formelsammlung“

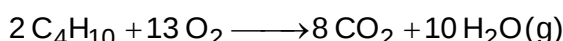
Die Beispiele stellen die Berechnung der Änderung der Enthalpie dar. Die Berechnungen zur Entropie bzw. Gibbs-Helmholtz-Gleichung verlaufen analog.

Beispiel 1:

Berechnen Sie die Änderung der Enthalpie bei der vollständigen Verbrennung von 2 kg Butan bei $T = 298,15 \text{ K}$ und $p = 101,325 \text{ kPa}$.

Hinweis: Gehen Sie vereinfacht davon aus, dass alle an der Reaktion beteiligten Stoffe gasförmig sind.

1. Formulieren der Reaktionsgleichung



2. Berechnen der Änderung der Enthalpie:

$$\begin{aligned}\Delta H &= n(\text{CO}_2) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2) + n(\text{H}_2\text{O}) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}) - \left[n(\text{O}_2) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{O}_2) + n(\text{C}_4\text{H}_{10}) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{C}_4\text{H}_{10}) \right] \\ &= 8 \text{ mol} \cdot \left(-394 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) + 10 \text{ mol} \cdot \left(-242 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) - \left[13 \text{ mol} \cdot \left(0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) + 2 \text{ mol} \cdot \left(-126 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) \right] \\ &= -5320 \text{ kJ}\end{aligned}$$

Interpretation (fakultativ):

Bei der vollständigen Verbrennung von 2 mol Butan werden 5320 kJ abgegeben.

3. Berechnen der Stoffmenge (inkl. Berechnen der molaren Masse)

$$\begin{aligned}n(\text{C}_4\text{H}_{10}) &= \frac{m(\text{C}_4\text{H}_{10})}{M(\text{C}_4\text{H}_{10})} \\ &= \frac{2000 \text{ g}}{58 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \\ &\approx 34,48 \text{ mol}\end{aligned}$$

4. Berechnen der Änderung der Enthalpie für 2 kg:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta H_{(2\text{kg})}}{34,48 \text{ mol}} &= \frac{-5320 \text{ kJ}}{2 \text{ mol}} \\ \Delta H_{(2\text{kg})} &\approx -91,7 \text{ MJ}\end{aligned}$$

Variationsmöglichkeiten:

- Berechnen Sie die Reaktionsenthalpie für die vollständige Verbrennung von 1 mol Butan.

$$\left(\Delta_r H = \frac{\Delta H}{n(\text{C}_4\text{H}_{10})} = \frac{-5320 \text{ kJ}}{2 \text{ mol}} = -2660 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right)$$

- Berechnen Sie die abgegebene Wärme von 2 g Butan, wenn sich 1000 g Wasser um 20 K erwärmen. ($Q = 83,66 \text{ kJ}$)

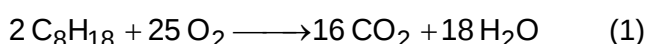
Beispiel 2:

Verbrennungsmotoren werden u. a. mit Benzin (vereinfacht: Octan) betrieben. Als mögliche Alternative wird der Einsatz von Methanol vorgeschlagen.

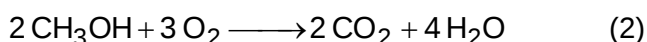
Vergleichen Sie die beiden Kraftstoffe hinsichtlich Kohlenstoffdioxid-Emission und Energiegehalt.

1. Formulieren der Reaktionsgleichung

Vollständige Verbrennung von Octan:



Vollständige Verbrennung von Methanol:



2. Berechnung der Änderung der Enthalpie

Reaktion (1):

$$\begin{aligned} \Delta H_{(1)} &= n(\text{CO}_2) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2) + n(\text{H}_2\text{O}) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}) - \left[n(\text{C}_8\text{H}_{18}) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{C}_8\text{H}_{18}) + n(\text{O}_2) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{O}_2) \right] \\ &= 16 \text{ mol} \cdot \left(-393,5 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) + 18 \text{ mol} \cdot \left(-241,8 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) - \left[2 \text{ mol} \cdot \left(-208,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) + 25 \text{ mol} \cdot 0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right] \\ &= -10231,6 \text{ kJ} \end{aligned}$$

Interpretation (fakultativ):

Bei der vollständigen Verbrennung von 2 mol Octan-Molekülen werden 10231,06 kJ abgegeben und 16 mol Kohlenstoffdioxid-Moleküle emittiert.

Reaktion (2):

$$\begin{aligned} \Delta H_{(2)} &= n(\text{CO}_2) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2) + n(\text{H}_2\text{O}) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}) - \left[n(\text{CH}_3\text{OH}) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{OH}) + n(\text{O}_2) \cdot \Delta_f H^\circ(\text{O}_2) \right] \\ &= 2 \text{ mol} \cdot \left(-393,5 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) + 4 \text{ mol} \cdot \left(-241,8 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) - \left[2 \text{ mol} \cdot \left(-238,57 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) + 3 \text{ mol} \cdot 0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right] \\ &= -1277,06 \text{ kJ} \end{aligned}$$

Interpretation (fakultativ):

Bei der vollständigen Verbrennung von 2 mol Methanol-Molekülen werden 1277,06 kJ abgegeben und 2 mol Kohlenstoffdioxid-Moleküle emittiert.

Ein Vergleich der beiden Kraftstoffe ist an diesem Punkt nicht möglich, da es keine einheitliche Bezugsgröße gibt.

3. Vergleich der Kraftstoffe bezüglich der Kohlenstoffdioxid-Emission

Um die Kohlenstoffdioxid-Emission zu vergleichen, kann man

- Berechnung der Stoffmenge an freigesetztem CO_2 bei gleicher Änderung der Enthalpie, z. B. $\Delta H = -1000 \text{ kJ}$.
- Berechnung der Reaktionsenthalpie bezogen auf 1 mol CO_2 .

Variante a:

Octan

$$\frac{n_{(1)}(\text{CO}_2)}{16 \text{ mol}} = \frac{-1000 \text{ kJ}}{-10231,6 \text{ kJ}}$$

$$n_{(1)}(\text{CO}_2) \approx 1,6 \text{ mol}$$

Methanol

$$\frac{n_{(2)}(\text{CO}_2)}{2 \text{ mol}} = \frac{-1000 \text{ kJ}}{-1277,06 \text{ kJ}}$$

$$n_{(2)}(\text{CO}_2) \approx 1,6 \text{ mol}$$

Auf dieselbe Änderung der Enthalpie bezogen entsteht bei beiden Kraftstoffe etwa dieselbe Stoffmenge Kohlenstoffdioxid. Keiner der Kraftstoffe hat hier einen Vorteil.

Variante b:

Octan

$$\begin{aligned}\Delta_r H(\text{CO}_2) &= \frac{\Delta H}{n(\text{CO}_2)} \\ &= \frac{-10231,6 \text{ kJ}}{16 \text{ mol}} \\ &\approx -639,5 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}\end{aligned}$$

Methanol

$$\begin{aligned}\Delta_r H(\text{CO}_2) &= \frac{\Delta H}{n(\text{CO}_2)} \\ &= \frac{-1277,06 \text{ kJ}}{2 \text{ mol}} \\ &\approx -638,5 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}\end{aligned}$$

Bei beiden Kraftstoffen wird eine nahezu identische Energiemenge bzgl. einer definierten Stoffmenge Kohlenstoffdioxid frei. Keiner der Kraftstoffe hat hier einen Vorteil.

4. Vergleich der Energiegehalte

Um die Energiegehalte zu vergleichen, kann man als Bezugsgröße die Masse $m = 1\text{ kg} = 1000\text{ g}$ wählen.

Berechnung der Stoffmenge n von jeweils $m = 1000\text{ g}$ der beiden Kraftstoffe

Octan

$$\begin{aligned}n(\text{C}_8\text{H}_{18}) &= \frac{m(\text{C}_8\text{H}_{18})}{M(\text{C}_8\text{H}_{18})} \\&= \frac{1000\text{ g}}{114,2\text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \\&\approx 8,76\text{ mol}\end{aligned}$$

Methanol

$$\begin{aligned}n(\text{CH}_3\text{OH}) &= \frac{m(\text{CH}_3\text{OH})}{M(\text{CH}_3\text{OH})} \\&= \frac{1000\text{ g}}{32\text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \\&= 31,25\text{ mol}\end{aligned}$$

Berechnen der Änderung der Enthalpie ΔH für die berechneten Stoffmengen n

Octan

$$\begin{aligned}\frac{-10231,6\text{ kJ}}{2\text{ mol}} &= \frac{\Delta H_{(1/\text{kg})}}{8,76\text{ mol}} \\ \Delta H_{(1/\text{kg})} &= \frac{-10231,6\text{ kJ} \cdot 8,76\text{ mol}}{2\text{ mol}} \\&= -44814,408\text{ kJ} \\&\approx -44,8\text{ MJ}\end{aligned}$$

Methanol

$$\begin{aligned}\frac{-1277,06\text{ kJ}}{2\text{ mol}} &= \frac{\Delta H_{(2/\text{kg})}}{31,25\text{ mol}} \\ \Delta H_{(2/\text{kg})} &= \frac{-1277,06\text{ kJ} \cdot 31,25\text{ mol}}{2\text{ mol}} \\&= -19954,0625\text{ kJ} \\&\approx -20\text{ MJ}\end{aligned}$$

Bei der Verbrennung von 1 kg Octan wird mehr als doppelt so viel Energie frei wie bei der Verbrennung von 1 kg Methanol.

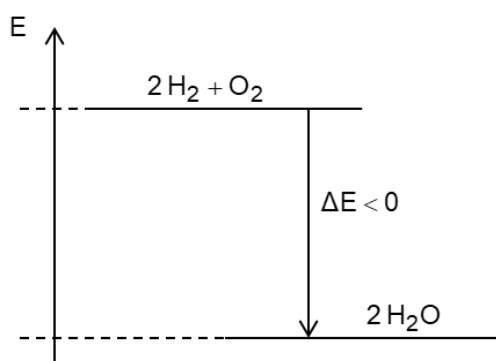
Grafische Darstellung des energetischen Verlaufs von Reaktionen

Grundlegend kann man zwischen Energiediagrammen und Energieverlaufsdigrammen unterscheiden. Beim Energiediagramm wird der relative Bezug zwischen innerer Energie der Edukte und innerer Energie der Produkte dargestellt. Die Änderung der inneren Energie und damit der energetische Verlauf werden eingezeichnet. Beim Energieverlaufsdigramm wird das Diagramm um den Reaktionsverlauf ergänzt, sodass die Entwicklung der inneren Energie des Systems, und damit die Aktivierungsenergie, dargestellt werden können.

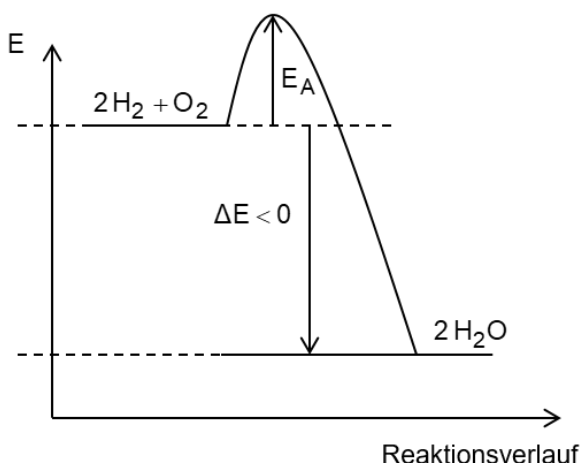
Analog können Enthalpiediagramme bzw. Enthalpieverlaufsdigramme erstellt werden. Neben der Achsenbeschriftung kann hier der konkrete Wert der Änderung der Enthalpie für die betrachtete Reaktion dargestellt werden.

Beispiel: Verbrennung von 2 mol Wasserstoff

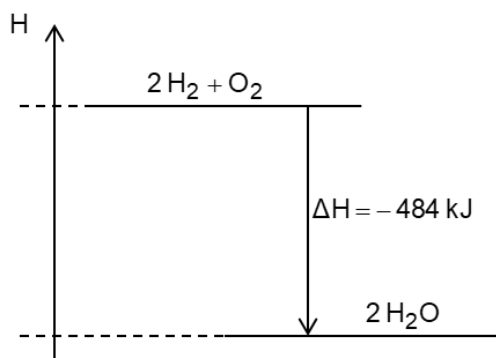
Energiediagramm



Energieverlaufsdigramm



Enthalpiediagramm



Enthalpieverlaufsdigramm

