

Die Wärmebilanz

chemischer Reaktionen



M. Seitz, M. Steinbrenner und P. Zachmann

- 1. Einleitung**
- 2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen mit Hilfe der Entropie**
- 3. Die Gibbs-Helmholtz-Gleichung**
- 4. Altlasten der Chemie**

1. Einleitung

Bildungsplan 2004

Bildungsstandards für Chemie

Klasse 10: **3. Chemische Reaktionen**

chemische Reaktionen unter stofflichen und energetischen Aspekten erläutern (endotherme und exotherme Reaktionen)

Kurstufe (4h): 1. Chemische Energetik

endotherm, exotherm

Änderungen der Entropie bei chemischen Reaktionen abschätzen

1. Einleitung

Bildungsplan 2004

Bildungsstandards für **Physik**

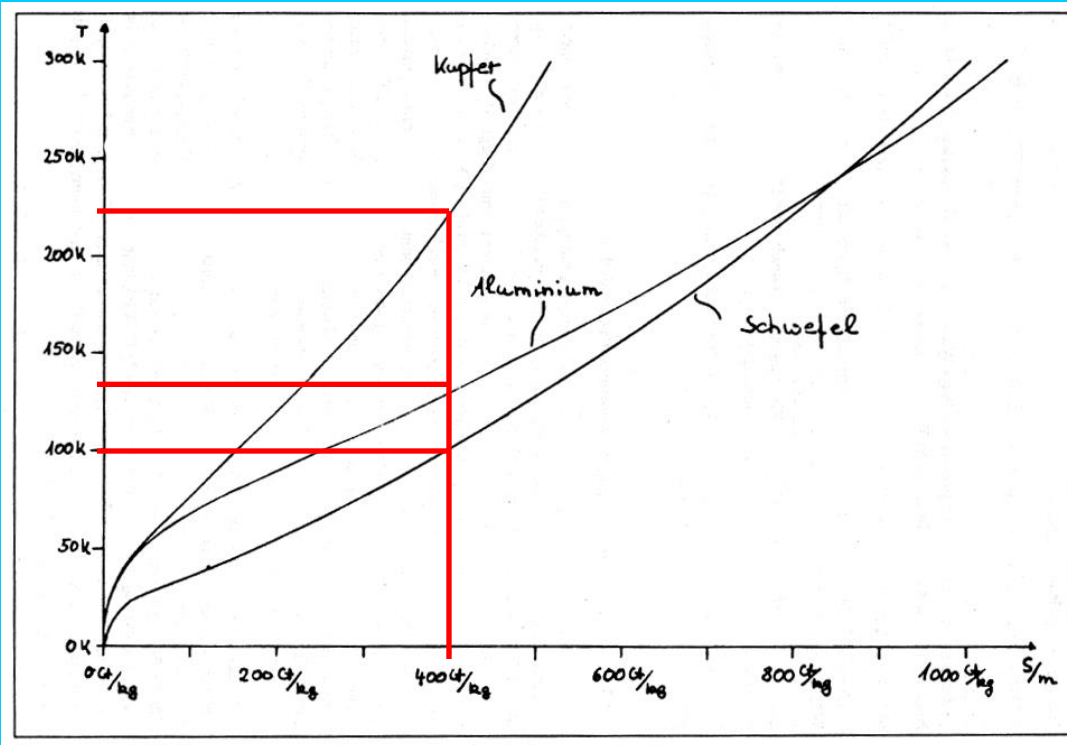
Klasse 10: **8. Grundlegende physikalische Größen**
Entropie, Entropieerzeugung

Bildungsstandards für **Naturwissenschaft u. Technik**

Klasse 10: **1. Prinzipien**
Energieträger – Energiespeicher – Energiestrom
Entropieerzeugung

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

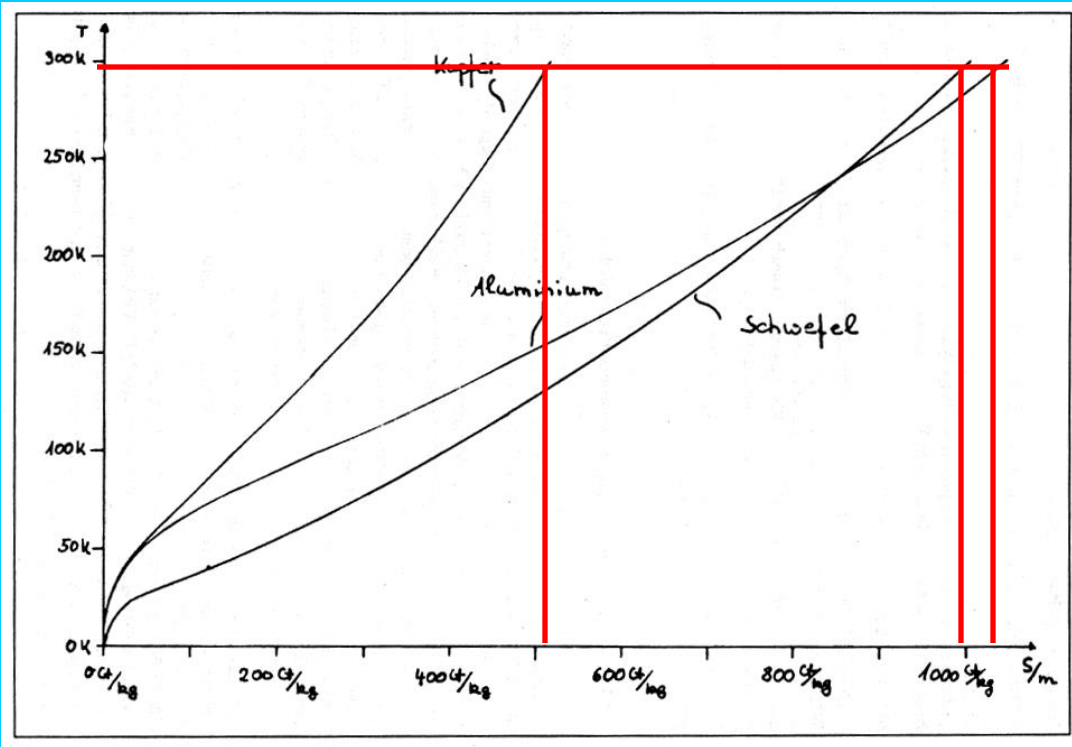
2.1 Entropie-Inhalte



Bei gleichem Entropie-Inhalt befinden sich verschiedene Stoffe auf unterschiedlicher Temperatur.

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

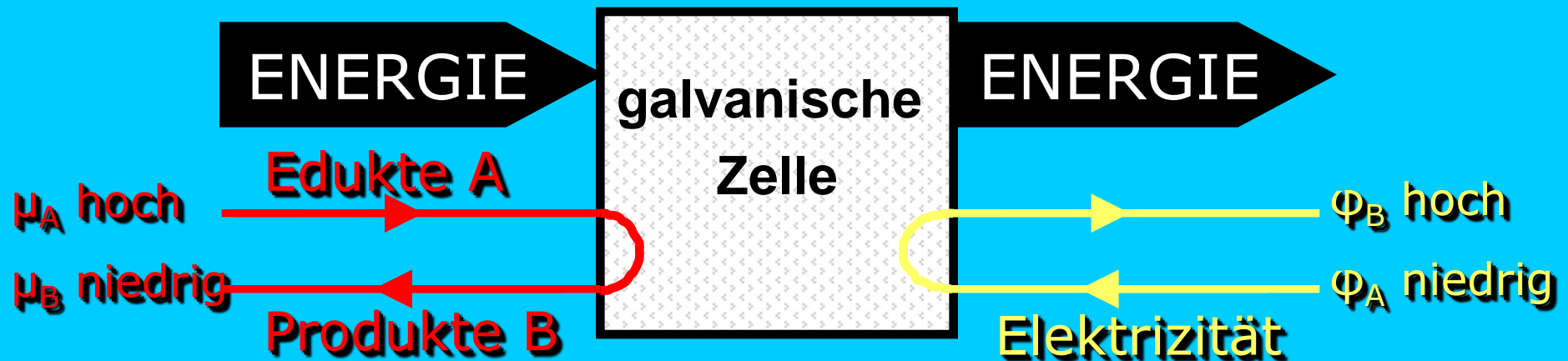
2.1 Entropie-Inhalte



Bei gleicher Temperatur enthalten verschiedene Stoffe unterschiedlich viel Entropie.

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

2.2 Entropie-Erzeugung



Frage: Wo bleibt die Energie, wenn die Reaktion frei abläuft?

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

2.2 Entropie-Erzeugung



Freier Fall des Wassers:
Entropieerzeugung



Kurzschluss einer Batterie:
Entropieerzeugung

Vermutung: Läuft eine Reaktion frei ab, so wird dabei Entropie erzeugt.

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

2.2 Entropie-Erzeugung

$$E = T \cdot S_{\text{erz}}$$

$$\Delta\mu \cdot n(\text{R}) = T \cdot S_{\text{erz}}$$

$$S_{\text{erz}} = \frac{\Delta\mu \cdot n(\text{R})}{T}$$

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

2.3 Entropie-Bilanz



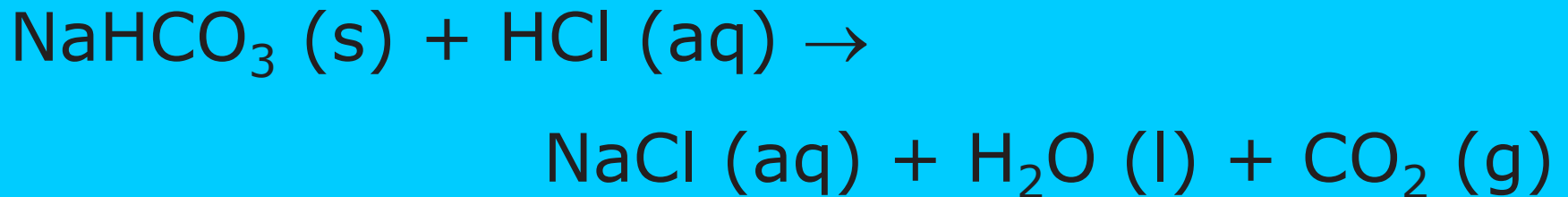
$$S_{\text{erz}} = \frac{\Delta\mu \cdot n(\text{R})}{T}$$

$$\begin{aligned} S_{\text{erz}} &= 250150 \text{ G} \cdot 1 \text{ mol} / 298 \text{ K} \\ &= 839,43 \text{ Ct} \end{aligned}$$

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

2.3 Entropie-Bilanz

2. Beispiel:



Für $n(\text{R}) = 1 \text{ mol}$ und $T = 298 \text{ K}$ gilt:

$$S_{\text{Edukte}} = 102,09 \text{ Ct} + 56,48 \text{ Ct}$$

$$= 158,57 \text{ Ct}$$

$$S_{\text{erz}} = 41570 \text{ G} \cdot 1 \text{ mol} / 298 \text{ K}$$

$$= 139,50 \text{ Ct}$$

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

2.3 Entropie-Bilanz

Für die Produkte stehen demnach zur Verfügung:

$$158,57 \text{ Ct} + 139,50 \text{ Ct} = \underline{298,07 \text{ Ct}}$$

Für die Produkte werden gebraucht:

$$S_{\text{Produkte}} = 115,47 \text{ Ct} + 69,61 \text{ Ct} + 213,64 \text{ Ct} = \underline{399,02 \text{ Ct}}$$

Demnach werden pro mol Umsatz gebraucht:

$$\begin{aligned} S_{\text{zu}} &= 399,02 \text{ Ct} - 298,07 \text{ Ct} \\ &= 100,95 \text{ Ct} \end{aligned}$$

Die Reaktion verläuft **endotherm**.

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

2.3 Entropie-Bilanz



Korrekte Entropiebilanz:

$$\begin{aligned} S_{\text{Edukte}} &= 41,63 \text{ Ct} + 116,14 \text{ Ct} \\ &= 157,77 \text{ Ct} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_{\text{erz}} &= 250150 \text{ G} \cdot 1 \text{ mol} / 298 \text{ K} \\ &= 839,43 \text{ Ct} \end{aligned}$$

Für die Produkte stehen demnach zur Verfügung:

$$157,77 \text{ Ct} + 839,43 \text{ Ct} = \underline{997,20 \text{ Ct}}$$

2. Die Wärmebilanz chemischer Reaktionen

2.3 Entropie-Bilanz

Für die Produkte werden gebraucht:

$$S_{\text{Produkte}} = 110,45 \text{ Ct}$$

Demnach bleibt übrig:

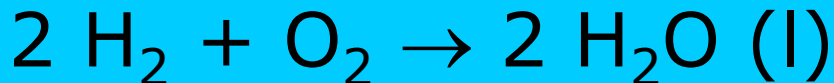
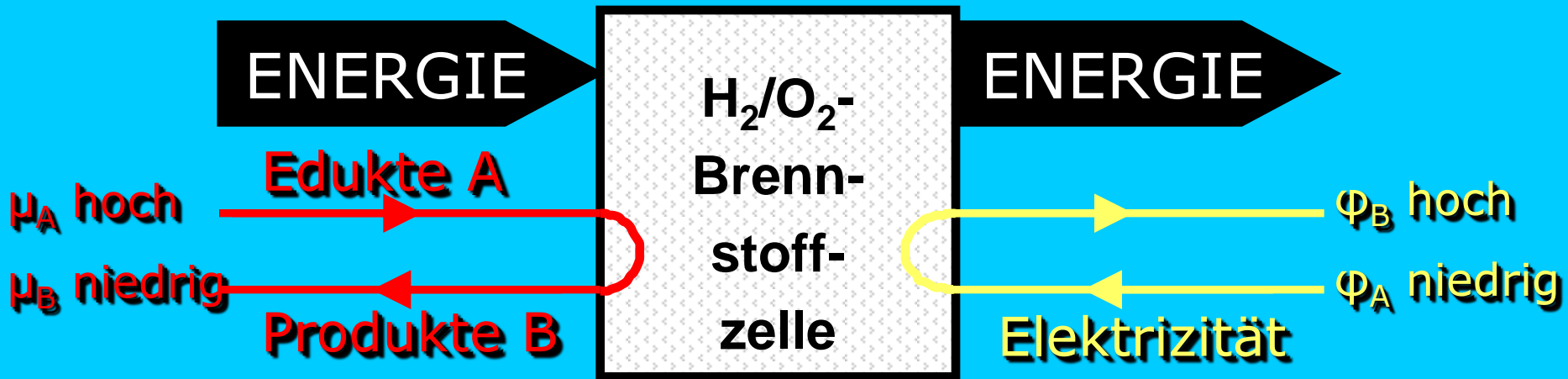
$$\begin{aligned} S_{\text{ab}} &= 997,20 \text{ Ct} - 110,45 \text{ Ct} \\ &= 886,75 \text{ Ct} \end{aligned}$$

Die Reaktion verläuft **exotherm**.

3. Die Gibbs-Helmholtz-Gleichung

Frei umladbare Energie:

Beispiel: elektrischer Energiebedarf 18000 kJ



$$\Delta\mu = 2 \cdot \mu(H_2) + \mu(O_2) - 2 \cdot \mu(H_2O) = 474,4 \text{ kG}$$

3. Die Gibbs-Helmholtz-Gleichung

Frei umladbare Energie:

Beispiel: elektrischer Energiebedarf 18000 kJ

$$E_{\text{herein}} = E_{\text{heraus}}$$

$$\Delta\mu \cdot n(\text{R}) = 18000 \text{ kJ}$$

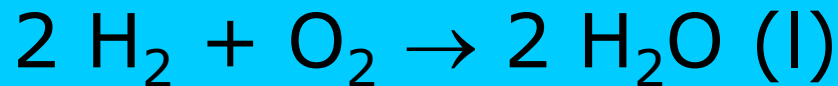
$$n(\text{R}) = \frac{18000 \text{ kJ}}{474,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}} = 37,9 \text{ mol}$$

$$\text{da } n(\text{R}) = \frac{1}{2} n(\text{H}_2) \text{ gilt : } n(\text{H}_2) = 75,8 \text{ mol}$$

3. Die Gibbs-Helmholtz-Gleichung

Heizenergie:

Beispiel: thermischer Energiebedarf 18000 kJ



$$\mathbf{S_{zu/ab} = S_{erz} + S_{Edukte} - S_{Produkte}}$$

Für $n(\text{R}) = 1 \text{ mol}$ gilt:

$$S_{\text{erz}} = 1590 \text{ Ct}$$

$$S_{\text{Edukte}} = 466,2 \text{ Ct}$$

$$S_{\text{Produkte}} = 139,8 \text{ Ct}$$

$$\mathbf{S_{ab} = 1590 \text{ Ct} + 466,2 \text{ Ct} - 139,8 \text{ Ct} = \mathbf{1916,4 \text{ Ct}}}$$

3. Die Gibbs-Helmholtz-Gleichung

Heizenergie:

Beispiel: thermischer Energiebedarf 18000 kJ

Für $n(\text{R}) = 1 \text{ mol}$ gilt:

$$E_{\text{heiz}} = T \cdot S_{\text{ab}} = 298 \text{ K} \cdot 1916,4 \text{ Ct} = 571 \text{ kJ}$$

$$n(\text{R}) = \frac{18000 \text{ kJ}}{571 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}} = 31,5 \text{ mol}$$

$$n(\text{H}_2) = 63 \text{ mol}$$

3. Die Gibbs-Helmholtz-Gleichung

18000 kJ

elektrische Energie

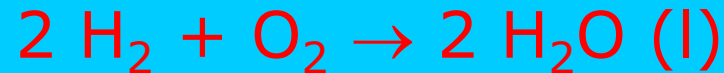
75,8 mol H₂

Heizenergie

63 mol H₂

3. Die Gibbs-Helmholtz-Gleichung

Die Gibbs-Helmholtz-Gleichung



$$\Delta_{\text{R}}\text{G} = - \Delta\mu \cdot n(\text{R})$$

$$\Delta_{\text{R}}\text{G} = - 474,4 \text{ kG} \cdot 1 \text{ mol} = - 474,4 \text{ kJ}$$

$$- T \cdot (S_{\text{Edukte}} - S_{\text{Produkte}}) = - 97,25 \text{ kJ}$$

$$\Delta_{\text{R}}\text{H} = \Delta_{\text{R}}\text{G} - T \cdot (S_{\text{Edukte}} - S_{\text{Produkte}})$$

$$\Delta_{\text{R}}\text{H} = -(474,4 \text{ kJ} + 97,25 \text{ kJ}) = -571,65 \text{ kJ}$$

$$\Delta_{\text{R}}\text{H} = \Delta_{\text{R}}\text{G} + T \cdot (S_{\text{Produkte}} - S_{\text{Edukte}})$$

$$\Delta_{\text{R}}\text{G} = \Delta_{\text{R}}\text{H} - T \cdot \Delta_{\text{R}}\text{S}$$

Gibbs-Helmholtz-
Gleichung

4. Altlasten der Chemie

Artikelreihe „**Altlasten der Physik**“ in *Praxis der Naturwissenschaften - Physik in der Schule*

[http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/
altlast/index.html](http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/altlast/index.html)

4. Altlasten der Chemie

Chemische Energie

- chemische Energie der Nahrung, die wir für unsere Lebensvorgänge nutzen ...
- chemische Energie der fossilen Brennstoffe ...
- Energie des Sonnenlichts wird durch die Photosynthese in chemischer Form gespeichert ...
- In galvanischen Zellen laufen Redoxreaktionen freiwillig unter Umwandlung von chemischer in elektrische Energie ab.

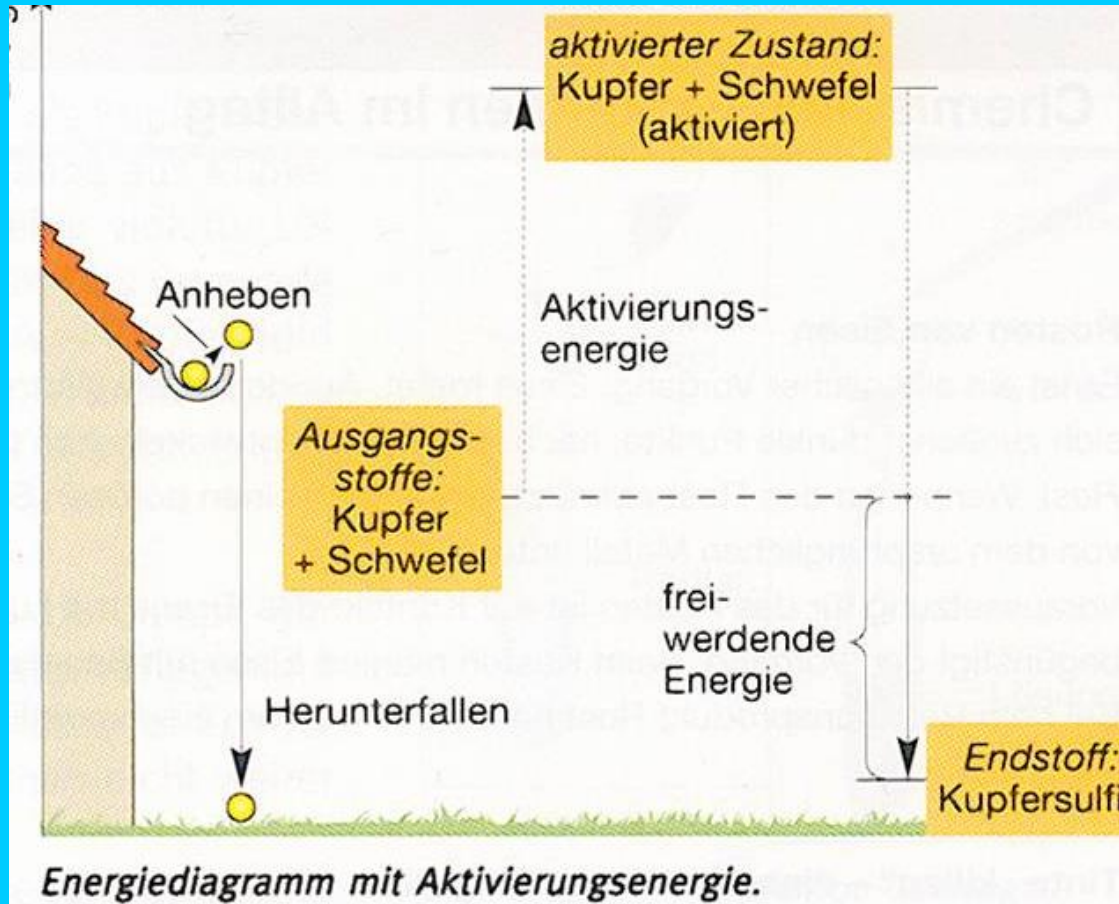
4. Altlasten der Chemie

Was ist mit chemischer Energie gemeint?

- Unterschied der „**Inneren Energie**“ des Systems vor und nach der chemischen Reaktion $\Delta_R U$ (auch „**Reaktionsenergie**“)?
- Änderung der „**Enthalpie**“ des Systems $\Delta_R H$ (auch „**Reaktionsenthalpie**“)?
z.B. die Heizanlagen oder Wärmekraftmaschinen mit Brennstoffen zugeführte Energie: $E_z = m_B H_u$ bzw. $E_z = m_B H_o$
mit m_B = Masse des Brennstoffs
 H_u = unterer Heizwert („**spezifischer Heizwert**“) wenn $H_2O(g)$
bzw. H_o = oberer Heizwert („**spezifischer Brennwert**“) wenn $H_2O(l)$
- „Maximale Nutzarbeit“, für beliebige Zwecke frei verfügbare Energie $\Delta_R G$ („**Freie Reaktionsenthalpie**“, „**Gibbs-Energie**“)?

4. Altlasten der Chemie

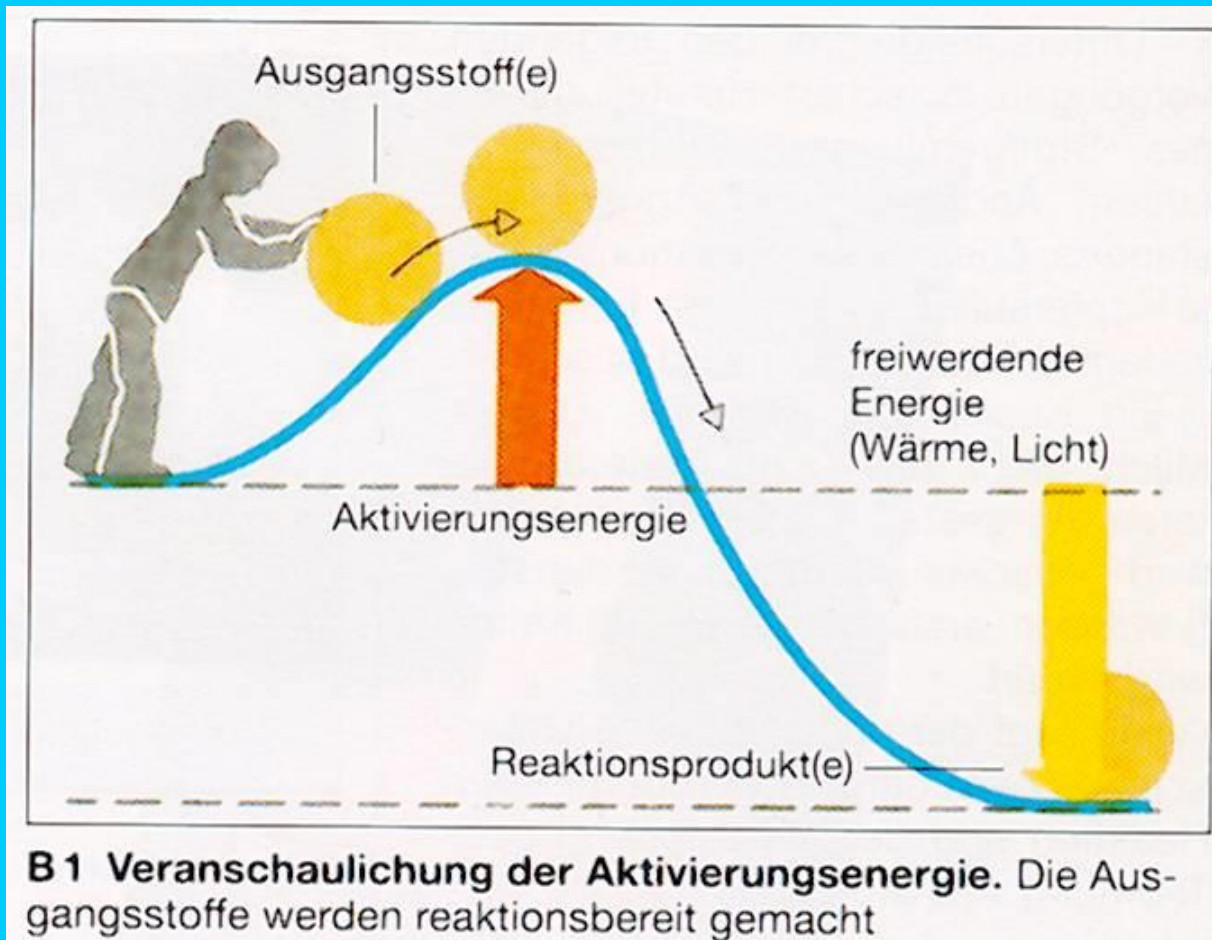
Energiediagramme



aus
Asselborn/Jäckel/Risch:
Chemie heute, SI
Baden-Württemberg. –
Hannover: Schroedel-
Verlag

4. Altlasten der Chemie

Energiediagramme

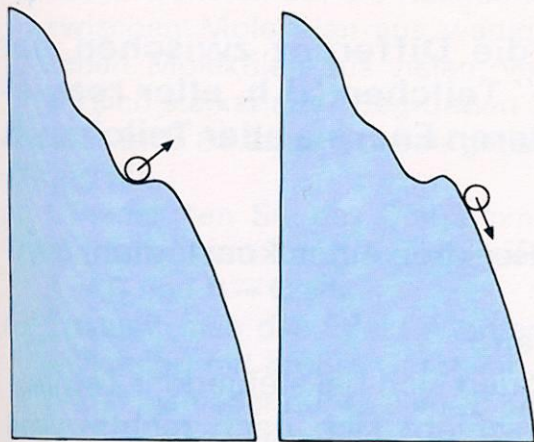


aus *Eisner u.a.:*
Elemente Chemie I,
Baden-Württemberg. –
Stuttgart: Klett-Verlag

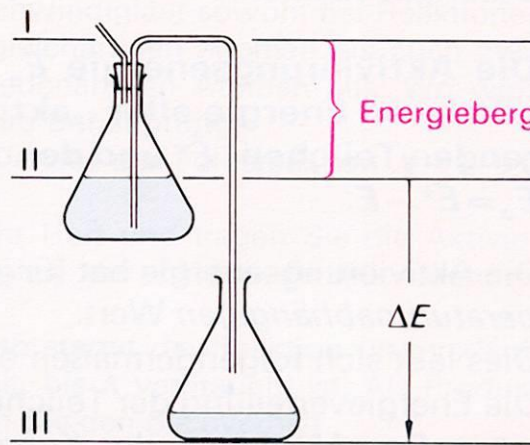
4. Altlasten der Chemie

Energiediagramme

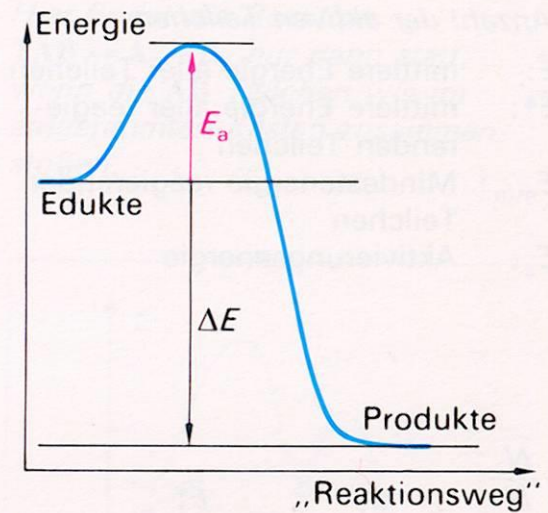
aus *Tausch/v. Wachtendonk*: Chemie SII, Stoff-Formel-Umwelt. – Bamberg: C.C.Buchner-Verlag



Die Kugel befindet sich zunächst in einer metastabilen Lage; wenn sie angestoßen wird, rollt sie von alleine den Berg hinunter.



Die Flüssigkeit im Kolben II hat eine metastabile Lage; wird sie durch Ausüben eines Drucks an I erstmals über den Berg gebracht, so fließt der gesamte Inhalt aus II in III über.



Die Edukte befinden sich aus energetischer Sicht in einer metastabilen Lage; ein „Energieberg“ trennt sie von den Produkten. Dieser Energieberg entspricht der Aktivierungsenergie.

B 83.1. Veranschaulichung der Aktivierungsenergie im „Kugel auf dem Berg“-Modell (a), im „Saugheber“-Modell (b) und im „Energieberg-Diagramm“ (c)

4. Altlasten der Chemie

Energiediagramme

aus Asselborn/Jäckel/Risch: Chemie heute, Sekundarbereich II. – Hannover: Schroedel-Verlag

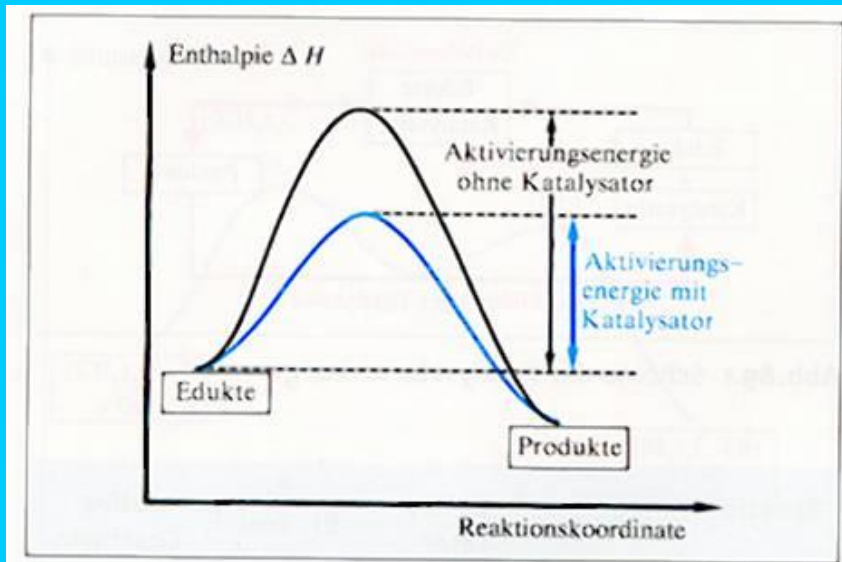
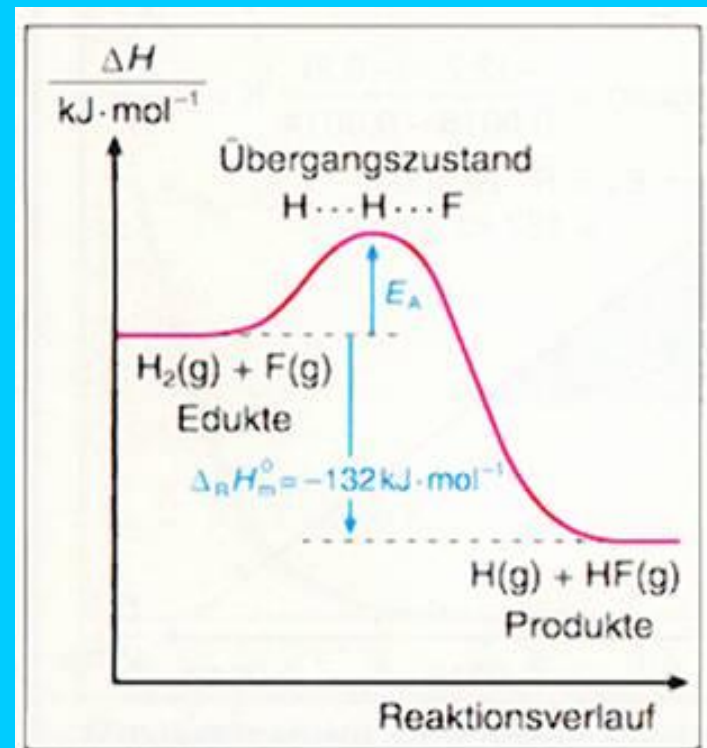


Abb. 90.1 Wirkung eines Katalysators. Die Erniedrigung der Aktivierungsenergie wird dadurch ermöglicht, dass die katalysierte Reaktion auf einem anderen Weg erfolgt als die nichtkatalysierte.

aus Dehnert u.a.: Allgemeine Chemie. – Hannover: Schroedel-V.



2. Aktivierungsenergie E_A und Reaktionsenthalpie ΔH

4. Altlasten der Chemie

Prinzip von J. Thomsen und M. Berthelot (1878)

„Die bei einer chemischen Reaktion frei werdende Wärmemenge und die Beständigkeit der bei diesen Reaktionen spontan sich bildenden Produkte sind ein Maß für die chemische Affinität.“

4. Altlasten der Chemie

Energiediagramme

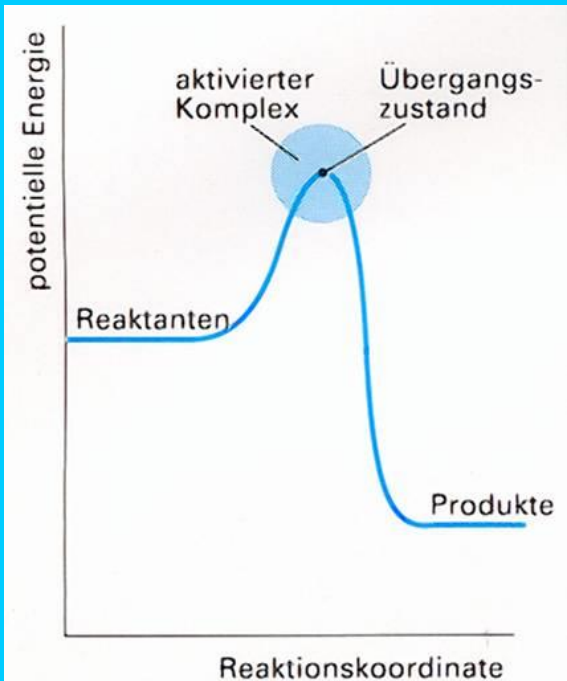
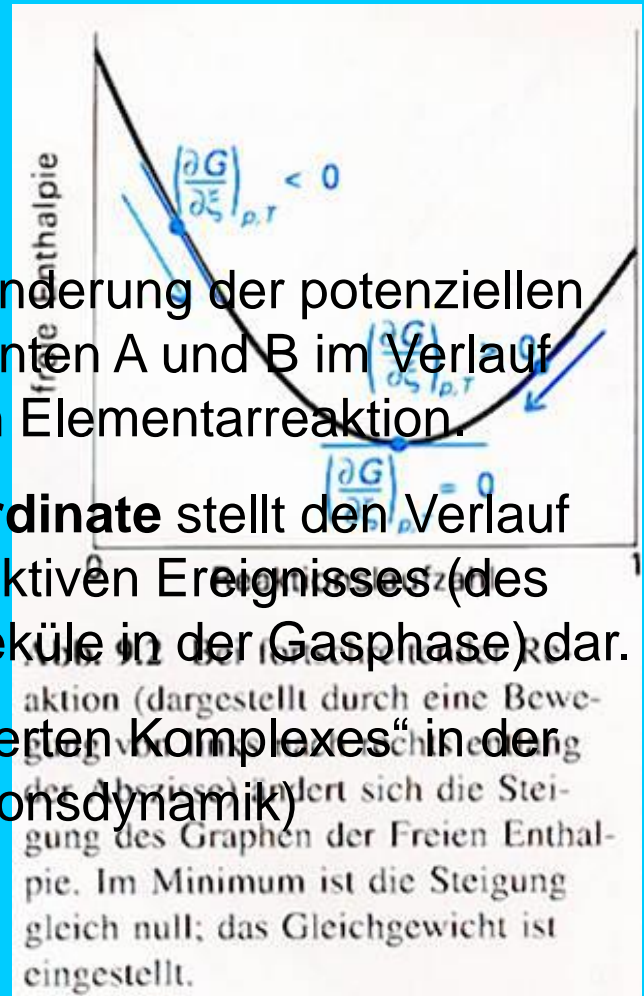


Abb. 27.5 Ein Reaktionsprofil. Die horizontale Achse stellt die Reaktionskoordinate dar, die vertikale Achse die potentielle Energie. Der aktivierte Komplex ist der Bereich um das Maximum der potentiellen Energie, der Übergangszustand entspricht genau dem Maximum.

aus *Atkins*:
Physikalische Chemie. –
Weinheim, Wiley-VCH-
Verlag

Dargestellt ist die Änderung der potenziellen Energie der Reaktanten A und B im Verlauf einer bimolekularen Elementarreaktion.

Die **Reaktionskoordinate** stellt den Verlauf eines einzelnen reaktiven Ereignisses (des Stoßes zweier Moleküle in der Gasphase) dar. („Theorie des aktivierten Komplexes“ in der Molekularen Reaktionsdynamik)





ENDE