

## Anleitung zur Berechnung von Bindungsenergien

Beispiel: Methangas verbrenne zu Kohlenstoffdioxid und Wasser. Berechne die freiwerdende Reaktionsenthalpie aus den tabellierten Bindungsenergien:

**1.) Lese die Aufgabenstellung sorgfältig, hieraus sollten sämtliche Reaktionsteilnehmer ersichtlich oder zumindest ableitbar sein. Für das Beispiel sind dies:**

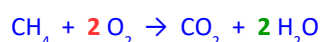
Methangas, Kohlenstoffdioxid und Wasser

**2.) Formuliere die Reaktionsgleichung aus den Reaktionsteilnehmern und überlege ob grundsätzlich die so formulierte Reaktion ablaufen kann**



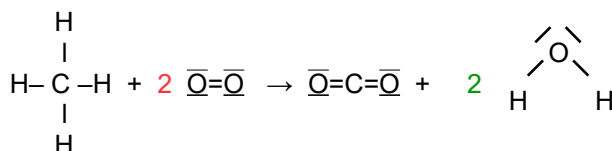
Bemerkung: Offensichtlich haben wir den Sauerstoff als Edukt vergessen, ansonsten kann die Reaktionsgleichung niemals aufgehen. Sauerstoff versteckt sich natürlich in „verbrenne zu“ (siehe Aufgabenstellung).

**3.) Formuliere die Reaktionsgleichung und passe die Stöchiometrie an:**



Bemerkung: Die Angabe des Aggregatzustandes ist für die Berechnung von Bindungsenthalpien aus Bindungsenergien weder notwendig noch sinnvoll.

**4.) Zeichne die Lewis-Strukturformeln. Dies hilft, sich die Moleküle vorzustellen und die einzelnen Bindungen besser zählen zu können**



**5. Liste sämtliche Bindungen mit entsprechender Stöchiometrie auf die gebrochen werden (alle Werte sind positiv) sowie sämtliche Bindungen mit entsprechender Stöchiometrie, die gebildet werden (alle Werte sind negativ) und berechne die Summe aller Energiebeträge:**

Gebrochene Bindungen:	4x (1 mol) C-H	= 4 mol (C-H)	= 4 x +413 kJ/mol	= +1652 kJ
	1x (2 mol) O=O	= 2 mol (O=O)	= 2x +498 kJ/mol	= +996 kJ
Gebildete Bindungen:	2x (1 mol) C=O	= 2 mol (C=O)	= 2x (-803 kJ/mol)	= -1606 kJ
	2x (2 mol) O-H	= 4 mol (O-H)	= 4x (-464 kJ/mol)	= -1856 kJ
		Total		= <u>-814 kJ</u>

**6.) Formuliere einen Lösungssatz:**

Die Reaktionsenergie aus den Bindungsenergien durch Verbrennung von 1 mol Methan beträgt -814 kJ.

## Aufgaben zum Thema Berechnung von Bindungsenergien

**Aufgabe 1)** Ethanol ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ) verbrennt mit Sauerstoff vollständig zu Kohlenstoffdioxid und gasförmigem Wasser.

- Formulieren Sie die Reaktionsgleichung
- Zeichnen Sie die Lewis-Strichformeln
- und berechnen Sie die Reaktionsenthalpie aus den einzelnen Bindungsenergien (Tabelle)

**Aufgabe 2)** Die Aminosäure Glycin ( $\text{CH}_2(\text{NH}_3)(\text{COOH})$ ) reagiert in einer Wasserstoffatmosphäre bei hohen Temperaturen zu Methan ( $\text{CH}_4$ ), Ammoniak ( $\text{NH}_3$ ) und Wasser ( $\text{H}_2\text{O}$ )

- Formulieren Sie die Reaktionsgleichung
- Zeichnen Sie die Lewis-Strichformeln
- Berechnen Sie die Reaktionsenthalpie aus den Bindungsenergien (Tabelle)

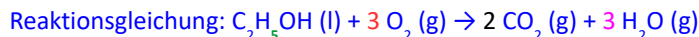
**Aufgabe 3)** Deuten Sie die Unterschiede zwischen den verschiedenen Bindungen aufgrund der Bindungsenergien (Tabelle).

- C-C (348 kJ/mol), C=C (614 kJ/mol) und C≡C (839 kJ/mol)
- N-N (163 kJ/mol), N=N (418 kJ/mol) und N≡N (945 kJ/mol)
- C-C (348 kJ/mol), C-H (413 kJ/mol) und C-F (489 kJ/mol)
- H-C (413 kJ/mol), H-O (464 kJ/mol) und H-F (567 kJ/mol)

Durchschnittliche molare Standardbindungsenergien in kJ/mol									
	-H	-C	=C	≡C	-N	=N	≡N	-O	=O
<b>C</b>	-413	-348	-614	-839	-305	-615	-891	-358	-745 *
<b>N</b>	-391	-305	-615	-891	-163	-418	-945	-201	-607
<b>O</b>	-463	-358	-745		-201	-607		-146	-498
<b>F</b>	-567	-489			-278			-193	
<b>Cl</b>	-431	-339			-192			-208	
<b>Br</b>	-366	-285						-234	
<b>I</b>	-298	-218						-234	
<b>P</b>	-323	-264						-335	
<b>S</b>	-367	-272	-536	H-H = -436 ; * -803 in CO <sub>2</sub>					

## LÖSUNGEN

**Aufgabe 1)** Ethanol ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ) verbrennt mit Sauerstoff vollständig zu Kohlenstoffdioxid und gasförmigem Wasser. Formulieren Sie die Reaktionsgleichung und berechnen Sie die Reaktions-enthalpie aus den einzelnen Bindungsenergien.



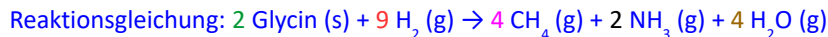
Gebrochene Bindungen:	1x (1 mol) C-C = 1 mol x 348 kJ/mol	= 348 kJ
	5x (1 mol) C-H = 5 mol x 413 kJ/mol	= 2065 kJ
	1x (1 mol) C-O = 1 mol x 358 kJ/mol	= 358 kJ
	1x (1 mol) O-H = 1 mol x 463 kJ/mol	= 463 kJ
	1x (3 mol) O=O = 3 mol x 498 kJ/mol	= 1494 kJ
	Total	= 4728 kJ

Gebildete Bindungen:	2x (2 mol) C=O = 4 mol x (-745 kJ/mol)	= - 2980 kJ
	2x (3 mol) O-H = 6 mol x (-463 kJ/mol)	= - 2778 kJ
	Total	= - 5758 kJ

Bilanz:  $\Delta H = 4728 \text{ kJ} - 5758 \text{ kJ} = -1030 \text{ kJ}$

Die Reaktionsenthalpie aus der Verbrennung von Ethanol aus den Bindungsenergien ergibt -1030 kJ

**Aufgabe 2)** Die Aminosäure Glycin ( $\text{CH}_2(\text{NH}_3^+)(\text{COO}^-)$ ) reagiert in einer Wasserstoffatmosphäre bei hohen Temperaturen zu Methan ( $\text{CH}_4$ ), Ammoniak ( $\text{NH}_3$ ) und Wasser ( $\text{H}_2\text{O}$ ). Formulieren Sie die Reaktionsgleichung, und berechnen Sie die Reaktionsenthalpie aus den Bindungsenergien.



Gebrochene Bindungen:	1x (2 mol) C-C = 2 mol x 348 kJ/mol	= 696 kJ
	1x (2 mol) C-N = 2 mol x 305 kJ/mol	= 610 kJ
	2x (2 mol) C-H = 4 mol x 413 kJ/mol	= 1652 kJ
	3x (2 mol) N-H = 6 mol x 391 kJ/mol	= 2346 kJ
	1x (2 mol) C=O = 2 mol x 745 kJ/mol	= 1490 kJ
	1x (2 mol) C-O = 2 mol x 358 kJ/mol	= 716 kJ
	1x (2 mol) O-H = 2 mol x 463 kJ/mol	= 926 kJ
	1x (9 mol) H-H = 9 mol x 436 kJ/mol	= 3924 kJ
	Total (aufgewendete Energie)	= 12360 kJ

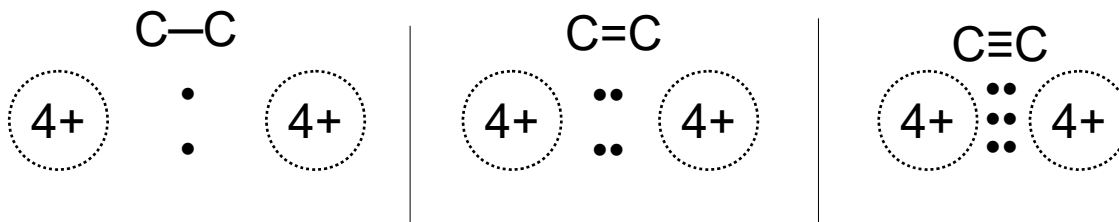
Gebildete Bindungen:	4x (4 mol) C-H = 16 mol x (-413 kJ/mol)	= - 6608 kJ
	3x (2 mol) N-H = 6 mol x (-391 kJ/mol)	= - 2346 kJ
	2x (4 mol) O-H = 8 mol x (-463 kJ/mol)	= - 3704 kJ
	Total (freigewordene Energie)	= - 12658 kJ

Bilanz:  $\Delta H = 12360 \text{ kJ} - 12658 \text{ kJ} = - 298 \text{ kJ}$

Die Reaktionsenthalpie aus der Umsetzung von Glycin in einer Wasserstoffatmosphäre aus den Bindungsenergien ergibt -298 kJ.

**Aufgabe 3)** Deuten Sie die Unterschiede zwischen den verschiedenen Bindungen aufgrund der Bindungsenergien.

a) C-C (348 kJ/mol), C=C (614 kJ/mol) und C≡C (839 kJ/mol)



Die Rumpfladung eines Kohlenstoffatoms beträgt +4. Je mehr Elektronen zwischen den positiven Ladungen sind, desto stärker nähern sich die Atome und desto stärker wird die Bindung. Die negativen Ladungen kompensieren die positive Abstossung der Rumpfladungen.

b) N-N (163 kJ/mol), N=N (418 kJ/mol) und N≡N (945 kJ/mol)

Je mehr Elektronen zwischen den positiv geladenen Atomrümpfen sind, desto stärker nähern sich die Atome und desto stärker wird die Bindung. Bei Stickstoff dürfte die höhere Rumpfladung (+5) im Gegensatz zu +4 bei Kohlenstoff und die kürzere Bindungslänge für zusätzliche Bindungsstärke verantwortlich sein. (N≡N = 110 pm; C≡C = 120 pm)

c) C-C (348 kJ/mol), C-H (413 kJ/mol) und C-F (489 kJ/mol)

Je polarer die Bindung desto stabiler

d) H-C (413 kJ/mol), H-O (464 kJ/mol) und H-F (567 kJ/mol)

Je polarer die Bindung desto stabiler. Die steigende Polarität erhöht das Ladungsungleichgewicht und verkürzt dadurch die Bindungslänge aufgrund der zusätzlichen Coulomb-WW. Man beachte die verkürzten Bindungslängen: (C-H = 110 pm, O-H = 96 pm, F-H = 92 pm)