

Kombinatorik bei der Fettumesterung

MARCO EISSEN – VOLKER WALTER – TOBIAS MARKS – JÜRGEN O. METZGER

Eine kombinatorische Problemstellung aus dem Bereich der Chemie lässt sich sowohl für den Mathematikunterricht der Klassenstufen 7/8 (Baumdiagramme) und Klassenstufen 9/10 (Binomialverteilung) als auch für den Chemieunterricht der Oberstufe thematisieren. Die praktische Umsetzung im Unterricht wird unterstützt durch vorbereitete Arbeitsblätter inklusive Hilfen und Musterlösung.¹ Das für den Chemieunterricht in der Oberstufe vorgesehene Arbeitsblatt enthält außerdem Aufgaben zur Biodieselherstellung (Gleichgewicht, Energetik, Mechanismus der Umesterung) und Fetthärtung. Letzteres ist für Chemiker vorgesehen. Ansonsten ist der Artikel für Nichtchemiker geschrieben.

1 Einleitung

Bei einer chemischen Reaktion werden meist zwei Stoffe, z. B. Stoff A und Stoff B, umgesetzt zu einem Stoff C oder vielleicht noch zu einem weiteren Stoff D: $A + B \rightarrow C$ oder $A + B \rightarrow C + D$.

Im Folgenden werden zwei Stoffe betrachtet, deren Molekülstruktur einem Dreizack ähnelt. Stoff A ist durch drei Gruppierungen charakterisiert, die mit F bezeichnet werden. Stoff B zeichnet sich durch drei Gruppierungen aus, die M genannt werden (Abb. 1). Konkret sind es Glycerintrioleat (Stoff A) und Glycerintriacetat (Stoff B).

Die Bezeichnung Glycerintrioleat beschreibt die Verbindung aus Glycerin und drei (tri) Ölsäuremolekülen. Verbindung (Glycerintrioleat) und Ausgangsstoffe (Glycerin, Ölsäuremoleküle) können chemisch durch Zugabe bzw. durch Entzug von

Wasser ineinander überführt werden. Bei der Verbindungsbildung entsteht die sogenannte Estergruppe als verbindendes Strukturelement (Überbrückung mit einem Sauerstoffatom, wobei in Nachbarschaft ein doppelt gebundenes Sauerstoffatom vorliegt) und wird im Namen durch die Endung ›eat‹ kenntlich gemacht (Abb. 2).

Fettumesterung

Bei einer Reaktion von Stoff A mit Stoff B werden bei bestimmten Reaktionsbedingungen die Gruppierungen F und M in allen möglichen Kombinationen ausgetauscht, so dass mehrere Produkte entstehen können.

Auch die Ausgangsstoffe sind im Reaktionsgemisch vorhanden (Abb. 3). Aus Estern entstehen wieder neue Ester, allerdings in neuer Zusammensetzung. Daher spricht man von einer Umesterung.

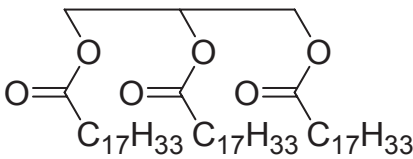
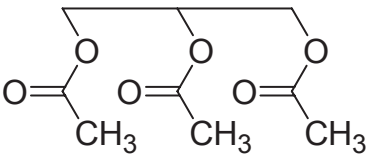
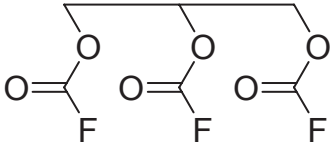
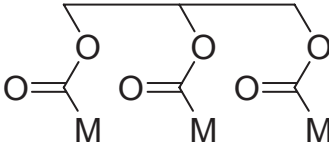
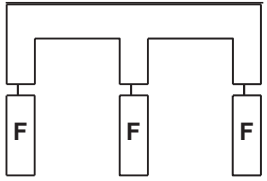
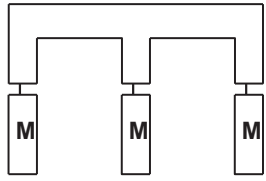
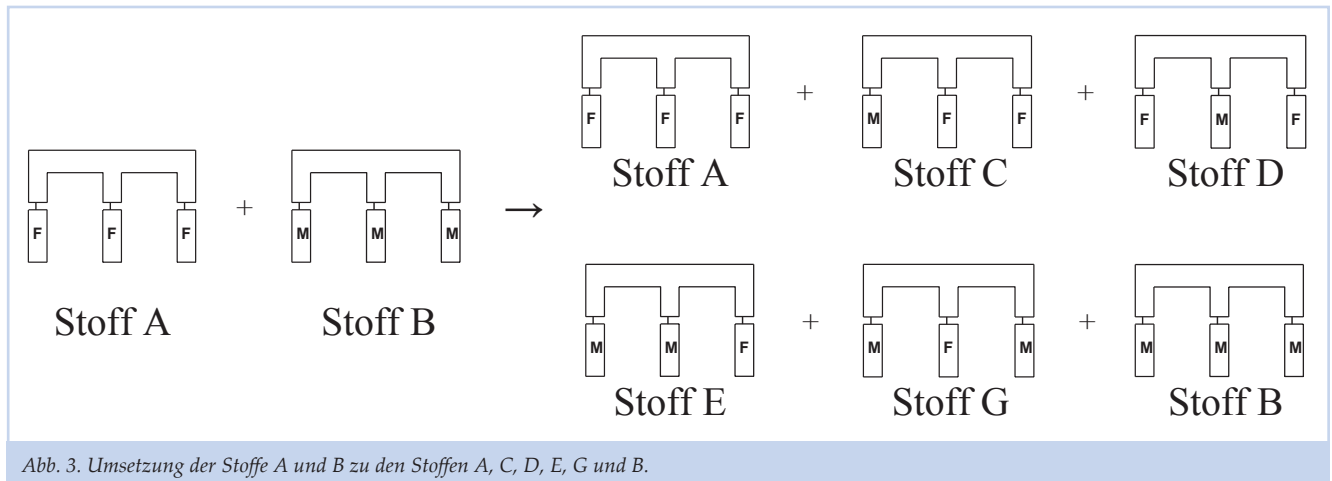
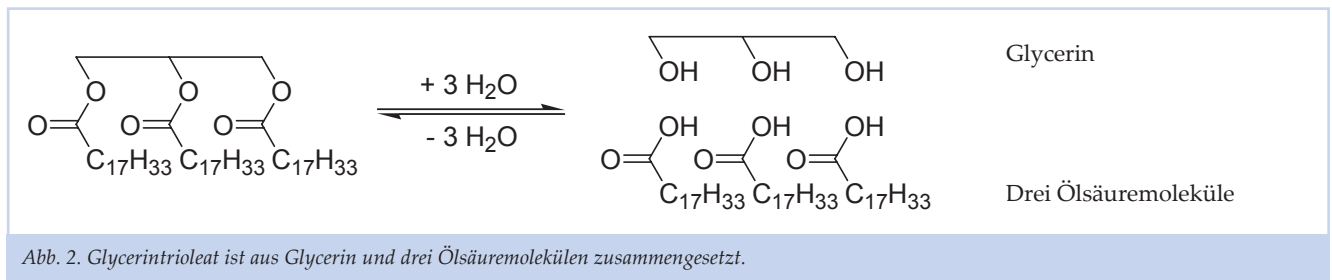
Name	Glycerintrioleat	Glycerintriacetat
Chemische Struktur		
Vereinfachte Struktur (F:=C ₁₇ H ₃₃ und M:=CH ₃)		
Struktur für den Mathematikunterricht		
Bezeichnung	Stoff A	Stoff B

Abb. 1. Strukturen von Glycerintrioleat und -triacetat, d. h. von zwei Stoffen A und B. (Glycerintrioleat ist nur ein Beispiel einer Vielzahl von möglichen Fettmolekülen).

¹ Die Arbeitsblätter sind als Online-Ergänzung abrufbar (www.mnu.de).



Die Gruppe F ist viel länger als die Gruppe M. Physikalische und andere Eigenschaften wie z. B. die Schmelztemperatur [1, S. 17] hängen von der Kombination und den Längen der Gruppen ab: je mehr längere Gruppen im Produktgemisch vorhanden sind, desto höher liegt in der Regel beispielsweise die Schmelztemperatur. Dies ist u. a. für die Herstellung von Schmiermitteln von Bedeutung. Mit der Wahl des Verhältnisses von A : B, d. h. durch beispielsweise die Erhöhung des Anteils an längeren Gruppen F lässt sich eine höhere Schmelztemperatur für ein Schmiermittel und die Konsistenz einstellen, ohne dass die Fettsäurereste chemisch verändert werden müssen, wie es bei der Hydrierung (Härtung) erfolgt [1, S. 17, 39], [2, Kap. 3.4.2], [3, S. 10].

Bloßes physikalisches Mischen von den Stoffen A und B führt in der Regel nicht zu den gewünschten Eigenschaften. Einerseits sind die Stoffe schon einmal gar nicht in beliebigen Mengen mischbar. Andererseits, mit Blick auf sicherheitstechnologische Aspekte, wird der Flammpunkt eines Gemisches, das beispielsweise vergleichsweise viel Glycerintrioleat enthält, niedriger sein, als ein Gemisch von Triglyceriden, in denen die meisten Bestandteile höhere Siedetemperaturen aufweisen.

In der Nahrungsmittelindustrie hat die Fettumesterung eine große Bedeutung. Die Einstellung der Schmelztemperatur bzw. eines vergrößerten Schmelztemperaturbereiches erfolgt z. B. bei Kuvertüre und Margarinen [1, S. 52], [4]. Das Kristallisationsverhalten spielt ebenfalls eine Rolle [1, S. 63], [4]. Beispielsweise lässt sich auch der schäumende Effekt [3, S. 16] von Schmalz verbessern, ebenso wie sein Einsatz als Backfett [1, S. 66]. Durch niedrigere Reaktionstemperaturen [5], bei denen sich einige Produkte durch Auskristallisieren entfernen lassen, oder durch den Einsatz von Enzymen [6, Kap. 5.1.5.6.2] erfolgt die Umordnung der Reste nicht ausschließlich nach dem Zufallsprinzip. Somit lassen sich Triglyceride bis zu einem gewissen Ausmaß maßgeschneidert herstellen. Dies ist für die Herstellung von Nahrungsergänzungsmitteln (z. B. Kakaobutteräquivalent, Ersatz für menschliches Milchlaktat) bedeutsam

[6, Kap. 5.1.5.6.2]. Durch Fettumesterung werden einige Emulgatoren hergestellt [3, S. 12].

Im betrachteten Fall wurden die Stoffe A und B in einem Verhältnis von 2:1 eingesetzt. Interessant ist nun eine genauere Beschreibung des Produktgemisches, wie es auch in der Literatur [1, S. 17] erfolgt. Daher soll mit den Arbeitsblättern die Frage beantwortet werden, mit welcher Wahrscheinlichkeit die Stoffe A, C, D, E, G, B entstehen, wenn das Verhältnis der Ausgangsstoffe zwei zu eins beträgt, d. h. A : B = 2 : 1.

2 Ergebnis und Diskussion

2.1 Mathematik Jahrgänge 7/8

Das Arbeitsblatt »Umordnungen bei einer chemischen Reaktion« (Online-Ergänzung) wurde dreimal in den Jahrgängen 7/8 eingesetzt, in denen mehrstufige Zufallsexperimente im vorherigen Unterricht thematisiert und mit Baumdiagrammen bearbeitet wurden. Die Schüler arbeiteten zu zweit oder in kleinen Gruppen. Jeder Schüler erhielt die erste Seite des Arbeitsblattes. Im Falle von Schwierigkeiten konnte auf die Hilfe für Aufgabe 1 zugegriffen werden. Reichte dies nicht, konnte auch schon die zweite Seite herangezogen werden, die einen Ansatz über die Struktur eines Baumdiagramms anbietet und Aufgaben zur Übung und Vertiefung enthält. Über die ausliegenden Lösungen sicherten die Schüler ihre Ergebnisse. Hierzu empfiehlt sich, wie in der Online-Ergänzung vorbereitet, ein beidseitiger Ausdruck mit großem Schriftzug z. B. »Lösung zu Aufgabe 1« auf der Oberseite, wobei die Unterseite die Lösung darstellt. Je nach Leistungsvermögen konnten die Schüler üben (Aufgabe 3) oder ihre Kenntnisse an einer anspruchsvolleren Problemstellung anwenden (Aufgabe 4). In Aufgabe 4 werden Stoff A (Glycerintrioleat) mit Stoff X (Hexansäurehexylester) umgesetzt. Es wurde auch beobachtet, dass, wenn zwei oder drei Gruppen sinnvolle Ansätze entwickelt haben, sich die Ideen in der Klasse herumsprachen. Insgesamt konnten sich die Schüler

erfolgreich mit dem Material beschäftigen und ihre Kenntnisse über den Einsatz von Baumdiagrammen zur Lösung dieses kombinatorischen Problems anwenden.

Zwecks Veranschaulichung des chemischen Vorgangs und der sich daraus ergebenden kombinatorischen Fragestellung zeichnete ein Kollege, dessen Zweitfach nicht Chemie ist, vereinfachend mehrere Dreizackkrümpfe und davon getrennt eine entsprechende Anzahl der Reste F und M an die Tafel. Daraus wurde für die Schüler die Wahrscheinlichkeit ersichtlich, mit der Rest F und Rest M sich an eine Position des Dreizacks setzen. Jedoch wurde dabei auch offensichtlich, dass sich die Wahrscheinlichkeit für die in der Lösung verbleibenden Reste verändert. Dies ist grundsätzlich richtig, denn es liegt eine hypergeometrische Verteilung vor.

In der Diskussion kamen die Schüler jedoch darin überein, dass sich die Wahrscheinlichkeit für einen einzelnen Rest F oder M aufgrund der Vielzahl an Teilchen de facto nicht ändert und eine gleich bleibende Wahrscheinlichkeit angenommen werden kann. Somit haben die Schüler sich bereits in der Jahrgangsstufe 7 inhaltlich über die Annäherung der hypergeometrischen Verteilung an die Binomialverteilung auseinandergesetzt, ohne diese zu kennen. Aufgaben in der Oberstufe handeln typischerweise von Tests, mit denen man beispielsweise eine Lieferung Schrauben auf defekte hin überprüft. Für große Anzahlen von Schrauben verwendet man nämlich näherungsweise die Binomialverteilung. Im Falle der vielen Teilchen gar nur in einem Milliliter Lösung gilt sie auch. Da kommt keine Schraubenfabrik mit!

Bemerkenswerterweise gab es keine Nachfragen zu dem Begriff Teilchen oder zu der Tatsache, dass sich eine Lösung aus vielen Teilchen zusammensetzt, obwohl die Schüler aus dem Chemieunterricht das Teilchenmodell noch gar nicht kannten. Es lässt sich nicht sagen, ob die Schüler zumindest eine vage Vorstellung entwickeln konnten oder es für sie wirklich klar war/wurde, dass es Teilchen gibt. Offensichtlich war dies für die mathematische Fragestellung jedoch ohne Bedeutung.

2.2 Mathematik Jahrgänge 9/10

Auch Schüler im Jahrgang 9/10 erhielten die erste Seite des Arbeitsblatts »Umordnungen bei einer chemischen Reaktion«. Ihr Methodenrepertoire beinhaltet bereits die Binomialverteilung. Dessen Anwendung auf das kombinatorische Problem ist jedoch insofern schwierig, als dass sie nur gelingt, wenn man zunächst zwischen den Stoffen E und G und den Stoffen C und D nicht unterscheidet und erst im Anschluss das Verhältnis jeweils untereinander bestimmt. Hierzu sei auf die Ergänzung verwiesen, die sich an die Lösung der Aufgaben zum Arbeitsblatt »Umordnungen bei einer chemischen Reaktion« anschließt. Diesbezüglich wird eine Unterstützung durch die Lehrkraft hilfreich, wenn nicht sogar nötig sein.

2.3 Chemie Oberstufe

Der Schwerpunkt des Arbeitsblattes »Veredelung von Fetten durch Umesterung« (Online-Ergänzung) liegt auf chemischen

Fragestellungen. Die Schüler konnten ihr Vorwissen zu den Themen Gleichgewicht, Verbrennungsenthalpie/Heizwert, Mechanismus zur Esterseifung und Hydrierung übertiefen. In der letzten Aufgabe handelt es sich dann um das kombinatorische Problem. Obwohl Stochastik kurz zuvor in den Mathematikkursen Thema war, konnten nur etwa 10 % der Schüler erfolgreich die Binomialverteilung anwenden. Dies bestätigt die Beobachtung, die im Jahrgang 10 im Fach Mathematik gemacht wurde. Die übrigen Schüler konnten mit Hilfe des für die Jahrgänge 7/8 vorgesehenen Arbeitsblattes über ein Baumdiagramm die Fragestellung bearbeiten. Daher bedarf es, wenn die Verwendung der Binomialverteilung angeregt werden soll, der Unterstützung durch die Lehrkraft wie im Jahrgang 10 im Fach Mathematik.

3 Zusammenfassung und Ausblick

In den Jahrgängen 7 bis 10 lässt sich die Fettumesterung als interessantes, anwendungsbezogenes Beispiel eines kombinatorischen Problems einsetzen. Je nach Kenntnisstand werden Baumdiagramm oder Binomialverteilung als Werkzeug eingesetzt. Im Falle der Anwendung der Binomialverteilung bedarf es der Unterstützung der Lehrkraft. Dies gilt auch, wenn das kombinatorische Problem im Chemieunterricht der Oberstufe auftaucht. Das für die Mittelstufe vorgesehene Arbeitsblatt wird sich sicherlich auch für die Mathematik in der Oberstufe eignen. Jedoch wurde dies bisher nicht geprüft.

Literatur

- [1] A. THOMAS: Fats and Fatty Oils. – In: Ullmanns Encyclopedia of Industrial Chemistry. – Weinheim: VCH publisher 2000.
- [2] D. J. ANNEKEN – S. BOTH – et al.: Fatty Acids. – In: Ullmanns Encyclopedia of Industrial Chemistry. – Weinheim: VCH publisher 2006.
- [3] I. P. FREEMAN: Margarines and Shortenings. – In: Ullmanns Encyclopedia of Industrial Chemistry. – Weinheim: VCH publisher 2000.
- [4] B. SREENIVASAN: Interesterification of Fats. – Journal of the American Oil Chemists' Society 55 (1978) 11, 796–805.
- [5] E. W. ECKEY: Directed Interesterification in Glycerides. – Ind. Eng. Chem. 40 (1948) 7, 1183–1190.
- [6] W. AEHLE – R. N. PERHAM – et al.: Enzymes. – In: Ullmanns Encyclopedia of Industrial Chemistry. – Weinheim: VCH publisher 2003.

Dr. MARCO EISSEN, marco.eissen@web.de, Gymnasium Ganderkesee, Am Steinacker 12, 27777 Ganderkesee unterrichtet die Fächer Chemie und Mathematik.

VOLKER WALTER und TOBIAS MARKS unterrichten am selben Gymnasium die Fächer Mathematik und Physik.

Prof. Dr. JÜRGEN O. METZGER, metzger@abiosus.org, abiosus e. V., Bloherfelder Straße 23, <http://www.abiosus.com> ■