

Wichtige Grundlagen stöchiometrischer Rechnungen

1 Einheiten

Zur quantitativen Beschreibung irgendwelcher physikalischen Größen werden die sogenannten "SI-Einheiten" (SI = Système International d'Unités) verwendet, die 1960 beschlossen und in den 70er Jahren in der BRD verbindlich wurden. Die SI-Einheiten fußen auf 7 Basisgrößen, deren Einheiten die Basiseinheiten des SI-Systems darstellen.

Basisgröße	Symbol	Name der Einheit	Abkürzung
Länge	l	Meter	m
Masse	m	Gramm	g
Zeit	t	Sekunde	s
el. Stromstärke	I	Ampère	A
Temperatur	T	Kelvin auch: Celsius	K °C
Stoffmenge	n	Mol	mol
Lichtstärke	I _v	Candela	cd

Bruchteile bzw. Vielfache der Einheit werden durch entsprechende Vorsilben (z. B. mikro-, milli-, centi-, kilo-, mega- etc.) gekennzeichnet. Aus den Basiseinheiten werden (in der Regel durch Produkt- oder Quotientenbildung) die abgeleiteten SI-Einheiten gebildet.

$$[\text{el. Ladung } Q] = 1 \text{ Coulomb} = 1 \text{ A} \cdot \text{s}$$

$$[\text{Volumen } V] = 1 \text{ m}^3 \text{ (1 Liter} = 1 \text{ L} = 0,001 \text{ m}^3)$$

Zur Quantifizierung einer Portion eines Reinstoffs (z.B. NaCl-Kristalle in einem Becherglas) können prinzipiell zwei Größen herangezogen werden: die **Masse** zugänglich über Wägung und die **Stoffmenge** zugänglich über stöchiometrische Umsetzungen. Die Stoffmenge ist eine messbare Eigenschaft einer Portion eines Reinstoffs. Ein Mol ist diejenige Stoffmenge einer Substanz, die aus ebenso vielen Elementareinheiten besteht, wie Atome in 0,012 kg = 12 g des Nuklids ¹²C enthalten sind. In dieser Stoffmenge sind stets 6,022 · 10²³ Elementareinheiten enthalten (Avogadro-Konstante).

Bei einheitlicher Dichte des zu charakterisierenden Stoffes, z.B. einer Flüssigkeit oder eines Gases, kann zusätzlich das Volumen (unter Nennung von Druck und Temperatur) zur Quantifizierung der Portion eines Reinstoffs herangezogen werden.

Die **Äquivalentstoffmenge** ist ein Vielfaches der Stoffmenge. Das Äquivalent (zu etwas) leitet sich aus der jeweiligen Reaktionsgleichung ab. Man unterscheidet **Säure/Base-Äquivalent**, **Redox-Äquivalent** und **Ladungs-Äquivalent**.

Die **molare Masse M** eines Stoffes X, ebenfalls eine abgeleitete SI-Einheit, gibt das Verhältnis der Masse m dieses Stoffes zu der dieser Masse entsprechenden Stoffmenge n an.

$$M = \frac{m}{n} \quad [M] = \text{g/mol}$$

Sie können molare Massen einer Verbindung leicht in guter Näherung aus den **relativen Atommassen** der in der Verbindung enthaltenen Elemente berechnen; denn die **atomare Masseneinheit u** entspricht der Masse eines ^{12}C -Atoms dividiert durch 12.

2 Gehalte

Gehalt = Oberbegriff für Angaben über Mengenverhältnisse. Gehalte geben Antwort auf die Frage: Wieviel ist von einem Element oder einer Verbindung in einem Stoff oder einem Stoffgemisch enthalten?

2.1 Anteile

Der Anteil ist definiert als dimensionsloser Quotient aus einer im Folgenden genannten Größe für eine Komponente x und der Summe der gleichen Größe aller Komponenten der Mischphase. Der Quotient kann nur Werte zwischen 0 und 1 annehmen.

2.1.1 Massenanteil w

$$w_x = \frac{m_x}{m_G} \quad m_x = \text{Masse der Komponente x, } m_G = \sum m_i$$

2.1.2 Stoffmengenanteil x

$$x_x = \frac{n_x}{n_G} \quad n_x = \text{Stoffmenge der Komponente x, } n_G = \sum n_i$$

2.1.3 Volumenanteil φ

$$\varphi_x = \frac{V_x}{V_0} \quad V_x = \text{Volumen der reinen Komponente x, } V_0 = \sum V_i$$

V_0 ist die Summe der Volumina der i Komponenten vor dem Vermischen. Bei Volumenkontraktion durch den Mischvorgang ist V_0 nicht mit dem Gesamtvolumen der Mischphase V_M identisch.

2.2 Konzentrationen

Konzentrationen sind Gehalte, die auf das Volumen der Mischphase V_M bezogen sind.

2.2.1 Massenkonzentration β

$$\beta_x = \frac{m_x}{V_M} \quad m_x = \text{Masse der Komponente } x, V_M = \text{Volumen der Mischphase}$$

2.2.2 Stoffmengenkonzentration c

$$c_x = \frac{n_x}{V_M} \quad n_x = \text{Stoffmenge der Komponente } x, V_M = \text{Volumen der Mischphase}$$

Die Äquivalent(stoffmengen)konzentration ist ein Vielfaches der Stoffmengenkonzentration

2.2.3 Volumenkonzentration σ

$$\sigma_x = \frac{V_x}{V_M} \quad V_x = \text{Volumen der Komponente } x, V_M = \text{Volumen der Mischphase}$$

2.2.4 Einheiten

$$[\beta] = \text{g/L} \quad ; \quad [c] = \text{mol/L}$$

σ ist dimensionslos, d.h. kann nur Werte zwischen 0 und 1 annehmen. Konzentrationen werden folgendermaßen angegeben (ausgewählte Beispiele):

$$c(\text{H}_2\text{SO}_4) = 0,1 \text{ mol/L} ; \quad c(1/2 \text{ H}_2\text{SO}_4) = c_{\text{eq}}(\text{H}_2\text{SO}_4) = 0,2 \text{ mol/L};$$

$$\beta(\text{Na}_2\text{SO}_4) = 1,24 \text{ g/L} \quad ; \quad \sigma(\text{N}_2) = 0,75$$

2.3 Umrechnungsmöglichkeiten

Volumina lassen sich in Massen (und umgekehrt) umrechnen, wenn die Dichte ρ bekannt ist. ($\rho = m/V$). Stoffmengen lassen sich in Massen (und umgekehrt) umrechnen, wenn die molare Masse M bekannt ist. Wegen der häufig auftretenden Volumenkontraktion beim Vermischen mehrerer Komponenten ist aus Konzentrationen nur dann ein Anteil berechenbar, wenn die Dichte der Mischphase bekannt ist.

3 Das Massenwirkungsgesetz

Das Massenwirkungsgesetz (MWG) gilt für **geschlossene Systeme, die sich im Gleichgewicht** befinden. Im Gleichgewicht ist die Änderung der freien Enthalpie (ΔG) null: $\rightarrow K = \text{const.}$

Beispielreaktion: $A + B \rightleftharpoons C + 2 D$

Reaktion in Lösung:

$$K = \frac{c(C) \cdot c^2(D)}{c(A) \cdot c(B)}$$

$c = \text{Stoffmengenkonzentration}$

Reaktion in der Gasphase:

$$K = \frac{p(C) \cdot p^2(D)}{p(A) \cdot p(B)}$$

$p = \text{Partialdruck}$

Wichtige Regeln für die Formulierung des MWG:

- (1) Alle Teilnehmer einer Reaktionsgleichung müssen einbezogen werden, sofern sie gelöst, bzw. bei Gasphasenreaktionen, sofern sie gasförmig sind. Das Gesetz gilt nur für ideale Lösungen bzw. ideale Gase. Bei hohen Konzentrationen treten Abweichungen auf, denen durch Einsatz sogenannter Aktivitäten ($a = c \cdot f(c)$) oder Fugazitäten ($f = p \cdot f(p)$) Rechnung getragen wird.
- (2) Die Gleichgewichtskonstante **K ist dimensionslos**; denn eine Dimension (= Einheit) kann man nicht logarithmieren. Jedoch zu K gehört immer eine **Normierung**, ohne die die Zahl keine eindeutige Aussage über das System macht. Standardmäßig sind Konzentrationen c (hier immer Stoffmengenkonzentrationen!!!!) auf 1 mol/L und Partialdrücke p auf 1,013 bar (= 1 atm) normiert, d.h. in die Gleichgewichtskonstante K geht ein Verhältnis (z.B. c zur Standardkonzentration 1 mol/L) ein.
- (3) Die Produkte stehen im Zähler, die Edukte im Nenner der Gleichgewichtskonstanten. Die Konzentrationen bzw. Partialdrücke auf der Produkt- bzw. Eduktseite der Reaktionsgleichung werden miteinander multipliziert. Die Koeffizienten der Reaktionsgleichung gehen als Potenzen ein.
- (4) Die Gleichgewichtskonstante ist **temperaturabhängig**, jedoch bei idealen Gasen und Lösungen weder abhängig vom Druck, dem Volumen noch von der Gesamtstoffmenge des Systems. (Nebenbemerkung: auch wenn K konstant bleibt, kann sich bei Änderung einer der drei Größen (Druck, Volumen, Gesamtstoffmenge) der Stoffmengenanteil jeder Komponente ändern. Das hängt von den Koeffizienten der Reaktionsgleichung ab.)
- (5) Unter dem Partialdruck p versteht man den Druck, den eine Komponente als ideales Gas in einem gegebenen Volumen erzeugen würde, wenn sie sich allein darin befände. Die Summe der Partialdrücke aller Komponenten des Systems ist gleich dem von außen messbaren Gesamtdruck P des Systems. Bei einer gegebenen Temperatur T ist $p = \text{const.} \cdot (n/V) = \text{const.} \cdot c$ (siehe ideales Gasgesetz).