

Aufgaben zu stöchiometrischen Berechnungen

Chem. Reaktionsgleichungen geben nicht nur eine *qualitative* sondern auch eine *quantitative* Beschreibung der chem. Vorgänge: die linke Seite einer Gleichung muß in Anzahl und Art der Atome mit der rechten übereinstimmen. Auch die Summen der Massen sind auf beiden Seiten gleich (*Gesetz von der Erhaltung der Masse*). Die Koeffizienten einer Reaktionsgleichung geben einerseits die Zahl der beteiligten Moleküle (bzw. Atome) andererseits aber auch den Stoffmengenumsatz an.

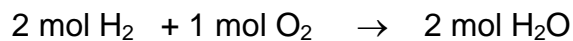
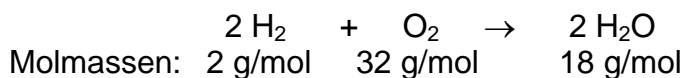
Das Maß für die *Stoffmenge* n ist das Mol.

Ein Mol einer molekularen Substanz besteht aus N_A Teilchen (N_A : Avogadro'sche Zahl: $6,022 \times 10^{23}$) und hat die Masse in (in g), deren Zahlenwert der *relativen Molekülmasse* M entspricht. M ergibt sich aus der Summe der relativen Atommassen aller Atome eines Moleküls. Die *molare Masse* ist die Masse eines Mols.

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

Aufgabe:

Wieviel g H_2 und O_2 benötigt man, um 20 g H_2O herzustellen?



$$\text{da } 20 \text{ g } H_2O \Rightarrow n = \frac{m}{M} = \frac{20 \text{ g}}{18 \text{ g/mol}} = 1,11 \text{ mol } H_2O \text{ ergibt sich somit:}$$



$$\text{an } H_2 \text{ werden benötigt: } M \times n = m \Rightarrow 2 \text{ g/mol} \times 1,11 \text{ mol} = \underline{2,22 \text{ g } H_2}$$

$$\text{an } O_2 \text{ werden benötigt: } 32 \text{ g/mol} \times 0,5 \times 1,11 \text{ mol} = \underline{17,78 \text{ g } O_2}$$

Wieviel L gasförmigem H_2 bzw. O_2 entspricht dies?

Molvolumen idealer Gase:

1 mol eines idealen Gases nimmt bei Normalbedingungen ($0^\circ C = 273 \text{ K}$, $1013 \text{ mbar} = 1 \text{ atm}$) ein Volumen von 22,4 L ein. Anders formuliert:

$$V_m = 22,4 \text{ L/mol}$$

$$\text{d.h. } 1,11 \text{ mol} \times 22,4 \text{ L/mol} = \underline{24,86 \text{ L } H_2 \text{ bzw. } 12,43 \text{ L } O_2}$$

Aufgabe:

Eine Steinkohle enthält 1,5 Gew.% Schwefel, der beim Verbrennen vollständig in SO₂ umgewandelt wird.

a) Wieviel kg SO₂ entstehen dabei aus einer Tonne Kohle?



1t Kohle enthält:

$$1000 \text{ kg} \times \frac{1,5}{100} = 15 \text{ kg} = 15000 \text{ g Schwefel}$$

$$n = \frac{m}{M} = \frac{15000 \text{ g}}{32 \text{ g/mol}} = 468,75 \text{ mol Schwefel}$$

nach der Reaktionsgleichung werden damit auch 468,75 mol SO₂ gebildet.

$$m(\text{SO}_2) = 468,75 \text{ mol} \times 64 \text{ g/mol} = \underline{30 \text{ kg SO}_2}$$

b) Wieviel L gasförmigem SO₂ entspricht dies?

$$468,75 \text{ mol} \times 22,4 \text{ L/mol} = \underline{10500 \text{ L SO}_2}$$

c) Wieviel L Sauerstoff werden für die Verbrennung des Schwefel verbraucht?

(machen Sie mal einen Vorschlag, Lösung gibts an dieser Stelle nicht! ;-)

Konzentrationsberechnungen

Die *Konzentration* einer Lösung ist die Menge eines gelösten Stoffes pro Menge der **Lösung**. Es gibt verschiedene Maßeinheiten für die Konzentration u.a.

$$\text{Molarität} = \frac{\text{Stoffmenge } n \text{ Gelöstes}}{1 \text{ Liter Lösung}} \text{ in [mol/L]}$$

$$\text{Gewichtsprozent} = \frac{\text{Masse } m \text{ Gelöstes}}{100 \text{ g Lösung}} \text{ in [%]}$$

Zur Umrechnung dieser beiden Konzentrationsangaben benötigt man noch die Dichte in [g/mL] = [g/cm³] bzw. [kg/L] der **Lösung**:

$$\text{Dichte } \rho = \frac{\text{Masse}}{\text{Volumen}} \text{ in [g/mL] oder [kg/L]}$$

Aufgabe:

Wieviel mL 70%iger HNO_3 (Dichte ρ : 1,42 kg/L) benötigt man zur Herstellung von 250 mL 2-molarer (d.h. $c = 2 \text{ mol/L}$) HNO_3 ? $M(\text{HNO}_3) = 63 \text{ g/mol}$

1.) zuerst bestimmen, welcher Stoffmenge entspricht 70%ige HNO_3 :

in 1 Liter „100%ige HNO_3 “ wären: ($V = 1 \text{ Liter}$)

$$\rho = \frac{m}{V} \Rightarrow m = \rho \times V = 1420 \text{ g/L} \times 1 \text{ L} = 1420 \text{ g HNO}_3$$

in 1 Liter 70%iger HNO_3 -Lösung sind daher: ($V = 1 \text{ Liter}$)

$$\rho = \frac{m}{V} \Rightarrow m = \frac{70}{100} \times 1420 \text{ g/L} \times 1 \text{ L} = 994 \text{ g HNO}_3$$

(d.h. die Konzentration einer 70%igen HNO_3 -Lösung beträgt 994 g pro Liter = 994 g/L)

$$994 \text{ g HNO}_3 \Rightarrow \frac{994 \text{ g}}{63 \text{ g/mol}} = 15,78 \text{ mol HNO}_3$$

$$\Rightarrow 15,78 \text{ mol/L HNO}_3$$

2.) Zur Herstellung von 250 mL 2-molarer HNO_3 benötigt man:

$$\text{es gilt: } c_1 \times V_1 = c_2 \times V_2$$

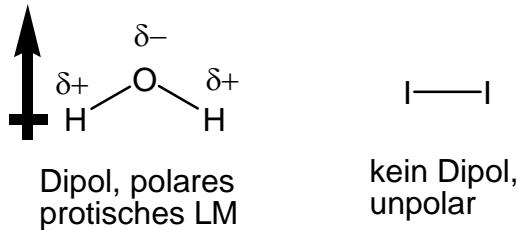
mit $c_1 = 15,78 \text{ mol/L}$, $c_2 = 2 \text{ mol/L}$ und $V_2 = 250 \text{ mL} = 0,25 \text{ L}$

$$\Rightarrow V_1 = \frac{2 \text{ mol/L} \times 0,25 \text{ L}}{15,78 \text{ mol/L}} = 0,0317 \text{ L} = 31,7 \text{ mL 70\%ige HNO}_3$$

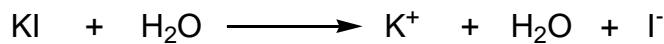
31,7 mL 70%ige HNO_3 werden mit Wasser auf 250 mL aufgefüllt und man erhält damit 250 mL 2-molare HNO_3

Zum Versuch Extraktion – Verteilungsgleichgewicht von I₂ in Wasser/Pentan

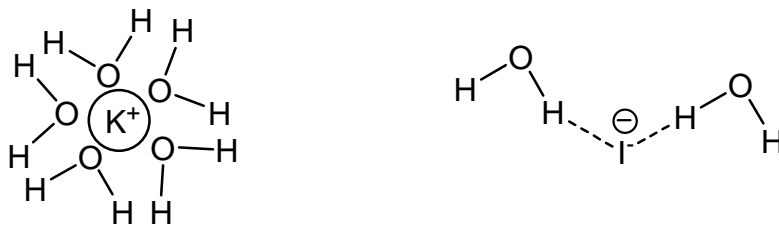
Problem: I₂ schlecht löslich in H₂O Warum?



Kaliumiodid (Salz, ionische Verbindung), gute Löslichkeit in polaren Lösungsmitteln



H₂O kann Kationen durch Ausbildung einer Hydrathülle stabilisieren, Anionen lassen sich durch Ausbildung von Wasserstoffbrücken stabilisieren:

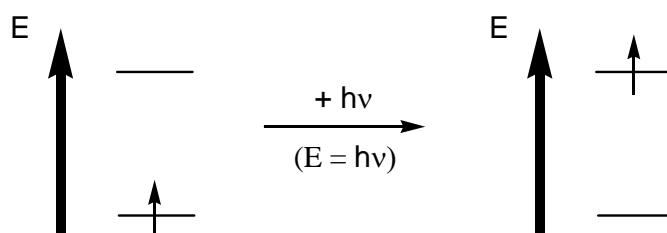


Löslichkeit von I₂ in Wasser verbessern durch Zugabe von KI:



I₂ reagiert dabei als Lewis-Säure (Elektronenpaar-Akzeptor), das Iodid-Ion als Lewis-Base (Elektronenpaar-Donor)

I₅⁻ werden in Helix der Stärke-Moleküle eingelagert --> Einschlußverbindungen
 blaue Farbe durch Bildung von Charge-Transfer-Komplex (CT-Komplex), d.h. Ladungstransferkomplex, e⁻ wird zwischen den Orbitalen versch. Atome/Moleküle übertragen:



Extraktion – physikalische Grundlagen

Gibt man zur Lösung einer Verbindung (A) in einem Solvens (1) ein zweites, mit (1) nicht mischbares Solvens (2), so verteilt sich – nach Einstellung des Gleichgewichts – die Verbindung A zwischen den beiden Solventien entsprechend dem Verhältnis der Löslichkeit von A in diesen beiden Solventien. Die Gleichgewichtslage wird durch den **Nernst'schen Verteilungssatz** beschrieben:

$$\frac{[A]_{\text{Solv.2}}}{[A]_{\text{Solv.1}}} = \frac{c_2}{c_1} = k$$

c: Gleichgewichtskonzentration der Substanz A in den Solventien 1 bzw. 2 [g/mol]

k: Verteilungskoeffizient (temperaturabhängig!)

Der einfache Nernst'sche Verteilungssatz (wie hier abgebildet) gilt nur, wenn sich die beiden Medien (hier Solvens (1) und (2)) nicht miteinander mischen und keine Assoziations- oder Dissoziationsvorgänge berücksichtigt werden müssen.

$$\frac{[I_2]_{\text{Pentan}}}{[I_2]_{\text{Wasser}}} = \frac{c_B}{c_A} = k$$

vor Einstellung des Gleichgewichts:

$$c_A = \frac{n_0^A}{V_A} \quad \text{und} \quad c_B = \frac{n_0^B}{V_B} = 0, \quad \text{da am Anfang kein } I_2 \text{ in Pentan vorliegt}$$

Scheidetrichter wird „geschüttelt“ --> GG stellt sich ein, Verteilung nach 1-mal Extrahieren:

$$c_A = \frac{n_1^A}{V_A} \quad \text{und} \quad c_B = \frac{n_1^B}{V_B} \quad \text{wobei } n_0^{\text{gesamt}} = n_0^A = n_1^A + n_1^B$$

$$k = \frac{c_B}{c_A} = \frac{\frac{n_0^A - n_1^A}{V_B}}{\frac{n_1^A}{V_A}} = \frac{V_A}{V_B} \left(\frac{n_0^A}{n_1^A} - 1 \right)$$

$$\Rightarrow n_1^A = \frac{n_0^A}{k \cdot \frac{V_B}{V_A} + 1}$$

nach i-maligem Extrahieren mit jeweils demselben Volumen V_B erhält man:

$$n_i^A = \frac{n_0^A}{\left(k \cdot \frac{V_B}{V_A} + 1\right)^i}$$

Beispiel:

1 mol I_2 wird in 100 mL Wasser gelöst und 2-mal mit jeweils 100 mL Pentan ausgeschüttelt. Wieviel I_2 befindet sich nach der Extraktion noch in der wässrigen Phase? (der Verteilungskoeffizient beträgt $k = 5$)

$$\frac{[I_2]_{\text{Pentan}}}{[I_2]_{\text{Wasser}}} = \frac{c_B}{c_A} = k$$

Index A bezieht sich auf H_2O , Index B bezieht sich auf Pentan
mit $n_0^A = 1 \text{ mol}$, $V_A = 100 \text{ mL}$ und $n_0^B = 0$, $V_B = 100 \text{ mL}$ ergibt sich:

nach 1-maligem Extrahieren:

$$n_1^A = \frac{1 \text{ mol}}{\left(5 \cdot \frac{100 \text{ mL}}{100 \text{ mL}} + 1\right)^1} = \frac{1}{6} \text{ mol} = 0.17 \text{ mol } I_2$$

es befinden sich noch 0,17 mol I_2 im Wasser, während die restlichen 0.83 mol I_2 bereits in die Pentanphase extrahiert wurden.

nach Trennen der beiden Phasen Wasser/Pentan wird die wässrige Phase nochmal mit 100 mL Pentan ausgeschüttelt (in diesem Pentan befindet sich am Anfang natürlich auch kein I_2)

nach 2-maligem Extrahieren:

$$n_2^A = \frac{1 \text{ mol}}{\left(5 \cdot \frac{100 \text{ mL}}{100 \text{ mL}} + 1\right)^2} = \frac{1}{36} \text{ mol} = 0.03 \text{ mol } I_2$$

es befinden sich nun noch 0,03 mol I_2 im Wasser (und 0.97 mol I_2 in insgesamt 200 mL Pentan), d.h. nach 2-mal Extrahieren mit insgesamt 200 mL Pentan haben Sie 97% der ursprünglich in Wasser gelösten I_2 -Menge in die organische Phase überführt.

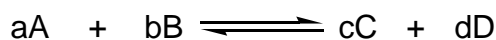
Zum selber rechnen:

Wieviel I_2 verbleibt im Wasser, wenn Sie **nur 1-mal**, aber dafür mit 200 mL = V_B Pentan ausschütteln? (Lösung: 0.091 mol I_2 verbleiben im Wasser)

Wieviel mL Pentan benötigen Sie, um mit **1-mal** Extrahieren 97% der I_2 -Menge in die organische Phase zu überführen? (Lösung: $V_B = 647$ mL Pentan)

Chemisches Gleichgewicht (chem. GG)

Viele chem. Reaktionen sind *reversibel*, d.h. aus den Ausgangsstoffen werden Endprodukte gebildet (Hinreaktion \rightarrow), die Endprodukte zerfallen aber wieder in die ursprünglichen Ausgangsstoffe (Rückreaktion \leftarrow):



Anfangs wird die Geschwindigkeit der Hinreaktion größer sein als die der Rückreaktion. Nach einiger Zeit haben sich die Geschw. beider Reaktionen angeglichen: es hat sich ein *chemisches Gleichgewicht* eingestellt (die Konzentrationen aller beteiligten Stoffe bleiben konstant), das so lange bestehen bleibt, bis das System in irgendeiner Weise geändert wird.

Achtung: GG heißt nicht, dass keine Reaktion mehr stattfindet, sondern nur das die Geschw. für Hin-und Rückreaktion gleich groß sind \rightarrow dynamisches GG!

Aussagen über die Konzentrationsverhältnisse der Stoffe im GG-Zustand („Lage des GG“) macht das *Massenwirkungsgesetz* (MWG) mit der *Gleichgewichtskonstanten* K:

$$K = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b} \quad [A]: \text{Konzentration von A (in mol/L)}$$

K ist abhängig von der Temperatur, aber nicht von den Konzentrationen oder vom Druck.

Die Temperaturabhängigkeit ist über die Beziehung zur freien Enthalpie G gegeben mit:

$$\Delta G = -RT \times \ln K$$

Ist $\Delta G = 0$, dann ist das System im Gleichgewicht.

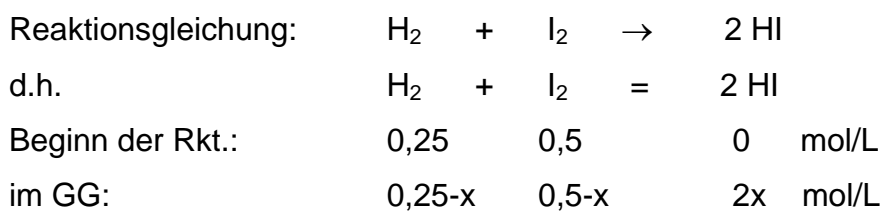
Chemische Prozesse laufen freiwillig ab, wenn $\Delta G < 0$ ist.

Wird das System geändert, z.B. durch die Erhöhung der Konzentration **eines** Reaktionspartners, so verändern sich die Konzentrationen der anderen Reaktionspartner derart, daß K wieder erfüllt ist:

Wird z.B. die Konzentration von A erhöht, vergrößern sich damit die Konzentrationen der Endprodukte (das GG verschiebt sich auf die Seite der Endprodukte). Ähnliches gilt, wenn die Konzentration eines Endprodukts z.B. C, etwa durch Ausfällung, vermindert wird: auch hier verschiebt sich das GG nach rechts auf die Seite der Endprodukte (*Prinzip des kleinsten Zwangs nach Le Chatelier*).

Aufgabe:

0,25 mol H_2 und 0,5 mol I_2 werden in einem 1-Liter-Kolben (also $V = 1L$) auf $448^\circ C$ erhitzt. Wie groß sind die Konzentrationen an H_2 , I_2 und HI nach Einstellung des Gleichgewichts ($K = 50,5$)?



$$K = \frac{[HI]^2}{[H_2] \cdot [I_2]}$$

$$50,5 = \frac{(2x)^2}{(0,25-x)(0,5-x)}$$

$$50,5(0,25-x)(0,5-x) = 4x^2$$

$$x^2 - 0,815x + 0,136 = 0 \quad \text{quadratische Gleichung } x^2 + px + q = 0$$

$$x_{1,2} = \frac{0,815}{2} \pm \sqrt{\frac{0,815^2}{4} - 0,136}$$

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

($x_1 = 0,58$) weil $[H_2] = 0,25 - x$ keine sinnvolle Lösung

$$\underline{x_2 = 0,234}$$

$$\Rightarrow [H_2] = 0,25 - x = 0,25 - 0,234 = \underline{0,016 \text{ mol/L}}$$

$$\Rightarrow [I_2] = 0,5 - x = 0,5 - 0,234 = \underline{0,266 \text{ mol/L}}$$

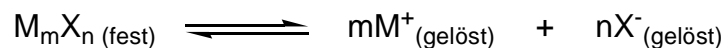
$$\Rightarrow [HI] = 2x = \underline{0,468 \text{ mol/L}}$$

Welche Konzentration an HI erhält man, wenn man die Reaktion mit 0,25 mol H₂ und 0,25 mol I₂ durchführt? (hier brauchen Sie keine quadratische Gl. zu lösen ;-)

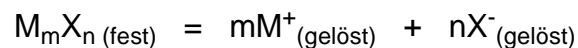
Ein „Spezialfall“ des Massenwirkungsgesetzes ist das

Löslichkeitsprodukt

Wird eine schwerlösliche Substanz mit Wasser in Kontakt gebracht, so stellt sich nach einiger Zeit ein GG zwischen der festen Phase (Niederschlag) und der flüssigen Phase (Lösung) ein (*heterogenes GG*):



bzw.



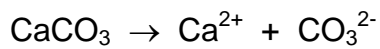
Die Geschwindigkeit der Auflösung und die Ausfällung ist dann gleich groß. Das GG wird durch das MWG beschrieben, wobei die Konzentration der festen Phase konstant ist und in die GG-Konstante einbezogen wird. Damit erhält man das *Löslichkeitsprodukt* K_L :

$$K_L = [M^+]^m \cdot [X^-]^n \quad \text{in} \quad \frac{\text{mol}^m}{\text{L}^n}$$

Das Löslichkeitsprodukt ist, wie alle GG-Konstanten, von der Temperatur abhängig. Die *Löslichkeit von Salzen* (angegeben in g/L) ist in der Praxis häufig größer als nach dem Löslichkeitsprodukt zu erwarten wäre, da neben der Ausfällung weitere Reaktionen stattfinden können, wie z.B. eine *Komplexbildung*, die den Niederschlag teilweise wieder auflöst,

Aufgabe:

Wieviel g CaCO_3 ($K_L = 4,9 \times 10^{-9} \text{ mol}^2/\text{L}^2$) lösen sich in 1L Wasser?



$$[\text{Ca}^{2+}] \times [\text{CO}_3^{2-}] = K_L = 4,9 \times 10^{-9} \text{ mol}^2/\text{L}^2$$

laut Reaktionsgleichung gilt: $[\text{Ca}^{2+}] = [\text{CO}_3^{2-}]$

d.h. $[\text{Ca}^{2+}]^2 = 4,9 \times 10^{-9} \text{ mol}^2/\text{L}^2$

$$[\text{Ca}^{2+}] = 7 \times 10^{-5} \text{ mol/L} \text{ und damit auch (siehe Reaktionsgl.): } [\text{CO}_3^{2-}] = 7 \times 10^{-5} \text{ mol/L}$$

$\Rightarrow 7 \times 10^{-5} \text{ mol CaCO}_3$ ($M = 100 \text{ g/mol}$) lösen sich in 1 Liter Wasser, und damit:

$$100 \text{ g/mol} \times 7 \times 10^{-5} \text{ mol} = \underline{7 \times 10^{-3} \text{ g}} \text{ CaCO}_3 \text{ lösen sich in 1 Liter.}$$

Löslichkeit von CaCO_3 in Wasser ist damit $7 \times 10^{-3} \text{ g/L}$ also ca. 7 mg/L, d.h. CaCO_3 ist in reinem Wasser kaum löslich!