

# Wichtige Formeln und Definitionen zu stöchiometrischen Berechnungen

## Atom- und Molekülmassen

Ein **Molekül** ist das kleinste für sich genommen existenzfähige Teilchen einer chemischen Verbindung. Die **Molekülmasse** ist die Summe der **Atommassen** aller Atome eines Moleküls. z.B. für  $A_aB_bC_c$ :  $M(A_aB_bC_c) = a \cdot M(A) + b \cdot M(B) + c \cdot M(C)$

Atom- und Molekülmassen werden in atomaren Masseneinheit u angegeben.

**1 u** ( $= 1.6605 \cdot 10^{-24}$  g) ist per Definition 1/12 der Masse eines Atoms des Isotops  $^{12}\text{C}$ .

**Massenanteile** w einer Verbindung der Formel  $A_aB_bC_c$ :

$$w(A) = a \cdot M(A) / [a \cdot M(A) + b \cdot M(B) + c \cdot M(C)] \quad \text{analog für } w(b) \text{ und } w(C).$$

**Gewichtsprozent:**  $w \cdot 100\%$

Bestimmung der Molmasse z.B. über Schmelzpunktniedrigung oder Siedepunkterhöhung:

$$\Delta T_g = E_g \cdot b = E_g \frac{m}{M} \frac{1000}{G} t \quad \text{wobei}$$

$b$  = molale Konzentration,  $E$  = ebullioskopische bzw. kryoskopische Konstante,  $m$  = Substanzmasse in g,  $M$  = Molmasse,  $G$  = Lösungsmittelmenge in g,  $t$  = Zahl der Teilchen, die pro Formeleinheit in Lösung gehen.

**Loschmidt-Zahl** bzw. **Avogadro-Konst.**  $N_A = 6.02209 \cdot 10^{23}$  entspricht einem Mol. Das ist die Anzahl Atome in 12 g Kohlenstoff des Isotops  $^{12}\text{C}$ , (also  $u \cdot \text{mol} = \text{g}$ )

**Stoffmenge**  $n = m / M$  [mol] Ein Mol entspricht  $N_A$  chemischen Einheiten.

Bestimmung von **Loschmidt-Zahl**  $N_A$  z.B. durch elektrolytische Abscheidung:

$$I \cdot t / F = m / (M \cdot z) \quad \begin{array}{l} I \cdot t = Q = \text{Ladungsmenge (A} \cdot \text{s} = \text{C)}, \\ F = N_A \cdot e \text{ Faraday-Konstante,} \\ m = \text{abgeschiedene Masse,} \\ z = \text{Äquivalentzahl, } M = \text{Molmasse.} \end{array}$$

## Substanz- und Molekularformel

Die **Substanzformel** („**empirische Formel**“) bringt das Zahlenverhältnis der Atome in einer Verbindung zum Ausdruck. Bei Molekülen muss zusätzlich noch die Molekülmasse bekannt sein, um die zweckmäßigere **Molekularformel** angeben zu können. Für die **Strukturformel** ist weitere chemische oder spektroskopische Information nötig.

Beispiel: 101.4 mg Substanz verbrennen zu 60.9 mg  $\text{H}_2\text{O}$  und 148.6 mg  $\text{CO}_2$ .

Wie lautet die empirische Formel dieser Verbindung?

→ In 0.1468g  $\text{CO}_2$  sind  $0.1468 \text{g} \cdot 12 / (12 + 2 \cdot 16) = 0.0468 \text{g C}$ , diese entsprechen  $0.0468 \text{g} / (12 \text{ g/mol}) = 0.00338 \text{ mol C}$ .

→ In 0.0609 mg  $\text{H}_2\text{O}$  sind  $0.0609 \text{g} \cdot 2 / 18 = 0.00681 \text{g H}$ , diese entsprechen  $0.00676 \text{ mol H}$ .

→ Die Differenz  $0.1014 \text{g} - 0.0468 \text{g} - 0.00681 \text{g} = 0.0540 \text{g}$  ergibt die Masse O, was einer Stoffmenge von  $0.0540 \text{g} / (16 \text{ g/mol}) = 0.00338 \text{ mol O}$  entspricht.

→ Division durch die kleinste Zahl (hier: 0.00338) liefert die empirische Formel „ $\text{CH}_2\text{O}$ “. Das könnte z.B. Formaldehyd ( $\text{CH}_2\text{O}$ ), Essigsäure ( $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ ), Milchsäure ( $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$ ) oder Glucose ( $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ ) sein!

## Konzentrationsmaße

**Massenkonzentration**  $\rho(X) = m(X)/V$  [g/l]

(m(X): Masse an Substanz X in einem Volumen V)

### Molarität = Stoffmengenkonzentration:

$$c(X) = n(X) / V(\text{Lösung}),$$

d.h. Molzahl an Stoff X pro Volumen der Lösung. [mol/l = 1 M]

**Molalität**  $b(X) = n(X) / m(\text{LM})$ ,

d.h. Molzahl pro Volumen des Lösungsmittels. [mol/kg]

### Normalität = Äquivalenzkonzentration

$$v_{\text{eq}}(X) = n_{\text{eq}}(X) / V \quad [\text{mol/l} = 1 \text{ N}]$$

### Äquivalenzstoffmenge

$$n_{\text{eq}}(X) = n(1/z^* X) = z^* \cdot n(X) = m(X) / (M z^*) \quad \text{mit Äquivalenzzahl } z^*.$$

Ein Äquivalent ist der Bruchteil  $1/z^*$  eines Teilchens, das in einer Neutralisationsreaktion ein Proton aufnehmen kann (1 HNO<sub>3</sub>, 1/2 H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, 1/3 H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>), in einer RedOx-Reaktion ein Elektron aufnehmen oder abnehmen kann (1/5 KMnO<sub>4</sub>, 1/2 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), bzw. bei Ionen eine Ladung aufweist (1/3 Fe<sup>3+</sup>, 1/2 SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>).

Zusammenhänge:  $c_{\text{eq}} = c(X) \cdot z^*$        $n_{\text{eq}} = n(X) \cdot z^*$

**Massenanteil** = Massenprozent = Gewichtsprozent

$$w = m(X) / m(\text{Mischung})$$

Analog: **Volumenanteil** und **Stoffmengenanteil (Molenbruch)**

**Verdünnung:**  $c_1 \cdot V_1 = c_2 \cdot V_2$  (Stoffmenge vorher (1) und nachher (2) sind gleich!)

## Sonstiges

**Dichte:**  $\rho = m/V$  [g/cm<sup>-3</sup>] Gesamtmasse in Gesamtvolumen.

**Ausbeute:** Bruchteil der theoretisch möglichen Substanzmenge in Prozent.

$$100\% \cdot m/m(\text{theoretisch}) \quad \text{bzw.} \quad 100\% \cdot n/n(\text{theoretisch}) \quad (\text{gibt identische Werte})$$

**Ideale Gasgleichung:**  $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$  wobei

$p$ : Druck [10<sup>5</sup> Pa] = [1 bar];  $V$ : Volumen [1 l = 10<sup>-3</sup> m<sup>3</sup>]  $n$ : Stoffmenge [1 mol]  
 $T$ : absolute Temperatur [1 K] (0 K = -273.15 °C)  $R = 8.31 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$   
universelle Gaskonstante

Normalbedingung: 0 °C = 273.15 K und Druck 1 atm = 1.013 bar = 101300 Pa.  
1 Mol eines idealen Gases hat dabei ein Volumen von **22.4 l = Molvolumen**

Standardbedingungen entsprechen 25 °C und 1 atm.

**Löslichkeitsprodukt** eines Salzes A<sub>a</sub>B<sub>b</sub>:  $K_L = c(A)^a \cdot c(B)^b$

## Namen von wichtigen Säuren und Laugen und davon abgeleiteten Ionen

### Säuren

Säure	Formel	Ionen /Formeln			
Schwefelsäure	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	Hydrosulfat	HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	Sulfat	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>
Schwefelige S.	H <sub>2</sub> SO <sub>3</sub>	Hydrosulfit	HSO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Sulfit	SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>
Salpetersäure	HNO <sub>3</sub>	Nitrat	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>		
Salpetrige S.	HNO <sub>2</sub>	Nitrit	NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>		
Phosphorsäure	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	Dihydrogenphosphat	H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	Phosphat	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>
Kohlensäure	"H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> "	Hydrogencarbonat	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Carbonat	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>
Essigsäure	H <sub>3</sub> CCOOH	Acetat	H <sub>3</sub> CCOO <sup>-</sup>		
Ameisensäure	HCOOH	Formiat	HCOO <sup>-</sup>		
Salzsäure	HCl	Chlorid	Cl <sup>-</sup>		
Flußsäure	HF	Fluorid	F <sup>-</sup>		Halogen
Halogenwasserstoffs.	HX	Halogenid	X <sup>-</sup>		=
Hypohalogen.	HOX	Hypohalogenit	XO <sup>-</sup>		Fluor
Halogenige S.	HXO <sub>2</sub>	Halogenit	XO <sub>2</sub> <sup>-</sup>		Chlor
Halogens.	HXO <sub>3</sub>	Halogenat	XO <sub>3</sub> <sup>-</sup>		Brom
Perhalogens.	HXO <sub>4</sub>	Perhalogenat	XO <sub>4</sub> <sup>-</sup>		Iod

### Basen

Name	Formel	Name	Formel	Name	Formel
Natronlauge	NaOH	Kalilauge	KOH	Hydroxid	OH <sup>-</sup>
Ammoniak	NH <sub>3</sub>	Ammonium	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	Amid	NH <sub>2</sub> <sup>-</sup>
Schwefelwasserstoff	H <sub>2</sub> S	Hydrosulfid	SH <sup>-</sup>	Sulfid	S <sup>2-</sup>