



Chemie

Formelsammlung

© 2003 Niklaus Burren

Inhaltsverzeichnis

1. Grundlagen.....	3
1.1. Definitionen	3
1.2. pH-Wert.....	4
2. Gasgesetze	5
2.1. Gasgleichung	5
2.2. Gasmischungen	5
3. Elektrochemie.....	6
3.1. Pol-Bezeichnungen	6
3.2. Elektrochemische Spannungsreihe	6
3.3. Nernst-Gleichung	8
3.4. Zusammenhang zwischen pH-Wert und Redox-Paar.....	8
3.5. Elektrolyse	9
4. Chemisches Gleichgewicht.....	10
4.1. Gleichgewichtskonstante K_C	10
4.2. Schwache Säure	11
4.3. Schwache Base	11
5. Pufferlösungen	12
5.1. Konjugierte Säure/Base-Paare.....	12
5.2. pH-Berechnung von Pufferlösungen	12
6. Thermodynamik.....	14
6.1. Wärmekapazität C	14
6.2. Enthalpie H	14
6.3. Entropie S	15
6.4. Freie Enthalpie G	15
6.5. Beziehung zwischen chemischen Grössen	16

1. Grundlagen

1.1. Definitionen

mol

Ein Mol eines Stoffes bestimmter Zusammensetzung enthält jeweils so viele Teilchen, wie Atome in 12g des Nuklids C12 enthalten sind.

Teilchen sind: Atome, Moleküle, Ionen, Elektronen

Ein mol enthält $(6.02252 \pm 0.00028) \cdot 10^{23}$ (Avogadrokonstante N_A)
Teilchen.

Molvolumen

22.4 l siehe Gasgesetze

Massengehalt

% g/100g

Volumengehalt

g/l

Stoffmengenkonzentration

mol/l

Molarität

z.B. 1M NaCl-Lösung \rightarrow 1mol/l

ppm

part par million: 10^{-6} -ter Teil (z.B. 1mg/kg; 1g/1t)

ppb

part par billion: 10^{-9} -ter Teil

ppt

part par trillion: 10^{-12} -ter Teil

Abkürzungen für den Aggregatzustand

f = fest (engl. solid s)

fl = flüssig (engl. liquid l)

g = gasförmig

aq = wässrige Lösung (engl. aequotic aq)

1.2. pH-Wert

pH = $\underbrace{\text{negativer Logarithmus}}_p$ der $\underbrace{\text{H}^+\text{-Konzentration}}_H$

Folgerung

starke Säuren: Ermitteln der H^+ -Konzentration bilden des negativen Logarithmus \rightarrow pH-Wert.

starke Basen: Ermitteln der OH^- -Konzentration bilden des negativen Logarithmus \rightarrow pOH-Wert.

$$\text{pH} = -\log(c(\text{H}^+))$$

$$\text{pOH} = -\log(c(\text{OH}^-))$$

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH}$$

2. Gasgesetze

2.1. Gasgleichung

Allgemeine Gasgleichung: $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$

Falls sich die Anzahl mol nicht ändert gilt folgendes Gesetz:

$$R = \text{Gaskonstante} = \frac{p_0 \cdot V_0}{T_0} = \frac{p_1 \cdot V_1}{T_1}$$

p_0 = Druck, 1.013 bar bzw. $1.013 \cdot 10^5$ Pa }
 V_0 = Volumen, Molvolumen = 22.4l } Standart-Bedingungen
 T_0 = Temperatur, 273.15K
 n = Anzahl mol

$$R = \text{Gaskonstante} \frac{p_0 \cdot V_0}{T_0} = 83.1 \cdot 10^{-3} \left[\frac{\text{bar} \cdot \text{l}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \right]$$

2.2. Gasmischungen

2.2.1. Partialdruck

Der Partialdruck $p(i)$ der Komponente i lässt sich über das allgemeine Gasgesetz errechnen. Der Partialdruck ist der Druck, den die Komponente i ausüben würde, wenn sie als einziges Gas in gleicher Menge und gleichen Volumen vorhanden wäre

Partialdruck:
$$p(i) = \frac{n(i) \cdot R \cdot T}{V}$$

Alle Parameter ohne (i) gelten für die gesamte Mischung.

2.2.2. Partialvolumen

Partialvolumen:
$$V(i) = \frac{n(i) \cdot R \cdot T}{p}$$

Verhältnisse in einer Gasmischung:
$$\frac{n(i)}{n} = \frac{p(i)}{p} = \frac{v(i)}{v}$$

3. Elektrochemie

3.1. Pol-Bezeichnungen

3.1.1. Galvanische Zelle

Anode = Minuspol = Oxidation

Eine Elektrode wird als Anode bezeichnet, wenn positive Ladungsträger in Lösung übergehen.

Kathode = Pluspol = Reduktion

Eine Elektrode wird als Kathode bezeichnet, wenn positive Ladungsträger von der Lösung zum Metall übergehen.

3.1.2. Elektrolyse Zelle

Anode = Pluspol = Oxidation

Eine Elektrode wird als Anode bezeichnet, wenn negative Ladungsträger von der Lösung zum Metall übergehen.

Kathode = Minuspol = Reduktion

Eine Elektrode wird als Kathode bezeichnet, wenn positive Ladungsträger von der Lösung zum Metall übergehen.

3.2. Elektrochemische Spannungsreihe

Die Anordnung der Standard-Potenziale E° nach zunehmenden positiven Werten wird als elektrochemische Spannungsreihe bezeichnet. Das Vorzeichen des Standard-Potenzials E° in Tabellen bezieht sich immer auf den Reduktionsschritt, deshalb die Bezeichnung Standard-Reduktions-Potenziale.

Bestimmung des Standard-EMK ΔE° :

$$\Delta E^\circ = [E^\circ \text{Kathode}] - [E^\circ \text{Anode}]$$

General gilt:

Der negativere (unedlere) Stoff wird zur Anode, der positivere (edlere) zur Kathode. Die Anode geht in Lösung (wird aufgelöst) und somit oxidiert.

Halbreaktion (T = 25°C)		E° [V]
oxidierte Form	reduzierte Form	
$\text{Li}^+ + \text{e}^-$	\leftrightarrow Li	-3.045
$\text{K}^+ + \text{e}^-$	\leftrightarrow K	-2.925
$\text{Rb}^+ + \text{e}^-$	\leftrightarrow Rb	-2.925
$\text{Cs}^+ + \text{e}^-$	\leftrightarrow Cs	-2.923
$\text{Sr}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Sr	-2.888
$\text{Ca}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Ca	-2.866
$\text{Na}^+ + \text{e}^-$	\leftrightarrow Na	-2.714
$\text{Ce}^{3+} + 3\text{e}^-$	\leftrightarrow Ce	-2.483
$\text{Mg}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Mg	-2.363
$\text{Be}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Be	-1.847
$\text{Al}^{3+} + 3\text{e}^-$	\leftrightarrow Al	-1.662
$\text{Mn}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Mn	-1.180
$\text{Zn}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Zn	-0.7628
$\text{Fe}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Fe	-0.440
$\text{Cr}^{3+} + \text{e}^-$	\leftrightarrow Cr^{2+}	-0.408
$\text{Cd}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Cd	-0.4029
$\text{PbSO}_4 + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow $\text{Pb} + \text{SO}_4^{2-}$	-0.3588
$\text{Co}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Co	-0.277
$\text{Ni}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Ni	-0.250
$\text{Sn}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Sn	-0.136
$\text{Pb}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Pb	-0.126
$2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow H_2	0.000
$\text{S} + 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow H_2S	+0.142
$\text{Sn}^{4+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Sn^{2+}	+0.15
$\text{AgCl} + \text{e}^-$	\leftrightarrow $\text{Ag} + \text{Cl}^-$	+0.222
$\text{Cu}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Cu	+0.337
$\text{Cu}^+ + \text{e}^-$	\leftrightarrow Cu	+0.521
$\text{I}_2 + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow 2I^-	+0.5355
$\text{MnO}_4^- + \text{e}^-$	\leftrightarrow MnO_4^{2-}	+0.564
$\text{Fe}^{3+} + \text{e}^-$	\leftrightarrow Fe^{2+}	+0.771
$\text{Ag}^+ + \text{e}^-$	\leftrightarrow Ag	+0.799
$\text{Hg}^{2+} + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow Hg	+0.854
$\text{Br}_2 + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow 2Br^-	+1.0652
$\text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$	\leftrightarrow $2\text{H}_2\text{O}$	+1.229
$\text{MnO}_2 + 4\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow $\text{Mn}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O}$	+1.23
$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 14\text{H}^+ + 6\text{e}^-$	\leftrightarrow 2Cr^{3+}	+1.330
$\text{Cl}_2 + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow 2Cl^-	+1.3595
$\text{PbO}_2 + 4\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow $\text{Pb}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O}$	+1.455
$\text{Au}^{3+} + 3\text{e}^-$	\leftrightarrow Au	+1.498
$\text{MnO}_4^- + 8\text{H}^+ + 5\text{e}^-$	\leftrightarrow $\text{Mn}^{2+} + 4\text{H}_2\text{O}$	+1.51
$\text{PbO}_2 + \text{SO}_4^{2-} + 4\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow PbSO_4	+1.682
$\text{Au}^+ + \text{e}^-$	\leftrightarrow Au	+1.691
$\text{O}_3 + 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow $\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$	+2.07
$\text{F}_2 + 2\text{e}^-$	\leftrightarrow 2F^-	+2.87

3.3. Nernst-Gleichung

Nernst-Gleichung:
$$\Delta E = \Delta E^\circ - \frac{R \cdot T}{n \cdot F} \cdot \ln(Q)$$

R = Gaskonstante, 8.314 J/mol · K

T = Absolute Temperatur in K

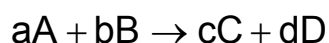
n = Anzahl transferierte Elektronen pro mol

F = Faraday-Konstante, 96487 As

Q = Quozient der Redoxreaktion

Gemäss Massenwirkungsgesetz gilt:

Q (bei chemischen Gleichgewichten k) errechnet sich aus dem Produkt der Konzentrationen der Produkte dividiert durch das Produkt der Konzentrationen der Edukte.



$$Q = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

Vereinfachung der Nernst-Gleichung

Die vereinfachte Nernstgleichung gilt für eine Temperatur von 25°C.

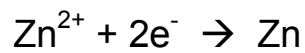
$$\Delta E = \Delta E^\circ - \frac{0.0257V}{n} \cdot \ln(Q)$$
$$\Delta E = \Delta E^\circ - \frac{0.059V}{n} \cdot \log(Q)$$

3.4. Zusammenhang zwischen pH-Wert und Redox-Paar

$$E = -59mV \cdot pH$$

3.5. Elektrolyse

1 mol Elektronen entspricht einer Ladung 96'487As (Faraday-Konstante). Um 1 mol Zink zu elektrolysieren werden 2 mol Elektronen benötigt:



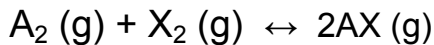
$$Q = I \cdot t$$

Q = Ladung [As]
I = Strom [A]
t = Zeit [s]

4. Chemisches Gleichgewicht

4.1. Gleichgewichtskonstante K_C

Für den Gleichgewichtszustand lässt sich eine stöchiometrische Gleichgewichtskonstante K_C definieren:



$$K_C = \frac{c(AX)^2}{c(A_2) \cdot c(X_2)}$$

Diese allgemeine Gleichung ist ein Beispiel für das Massenwirkungsgesetz (MWG). Die Konzentrationen werden in vielen Fällen in mol/l oder Partialdrücken angegeben.

Interpretation von K_C

Die Grösse K_C einer chemischen Reaktion gibt an, ob und in welchem Masse eine chemische Reaktion bis zum Erreichen des chemischen Gleichgewichts abläuft:

$K_C > 1$

Das Gleichgewicht liegt auf Seiten der Produkte, d.h. die Edukte reagieren in grossem Masse zu Produkten.

$K_C < 1$

Das Gleichgewicht der Reaktion liegt auf Seiten der Edukte, d.h. die Edukte reagieren kaum zu Produkten.

Die Gleichgewichts-Konstante K_C ist abhängig von der Temperatur.

Bruttoreaktion

Für eine Bruttoreaktion, die die Summe von n Einzelreaktionen darstellt, ist die Gleichgewichts-Konstante K_C gleich dem Produkt der Einzelreaktions-Konstanten:

$$K_C = K_1 \cdot K_2 \cdot K_3 \cdot K_n$$

4.2. Schwache Säure

$$\text{pH} = \frac{1}{2} \cdot (\text{pK}_S - \log(c))$$

pK_S = Negativer Logarithmus der Säurekonstante K_S .
 c = Konzentration in mol/l

4.3. Schwache Base

$$\text{pOH} = \frac{1}{2} \cdot (\text{pK}_B - \log(c))$$

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH}$$

pK_B = Negativer Logarithmus der Basekonstante K_B .
 c = Konzentration in mol/l

5. Pufferlösungen

5.1. Konjugierte Säure/Base-Paare

Pufferlösungen besitzen einen stabilen pH-Wert, der sich bei Zugabe von Säuren und Basen nicht wesentlich ändert (sie puffern ab). Sie wirken sowohl im sauren wie basischen Bereich.

Pufferlösungen bestehen im allgemeinen aus einer schwachen Säure (Puffersäure PS) und ihrer konjugierten Base (Pufferbase PB).

	Puffersäure PS	Pufferbase PB	pK _s
Perchlorsäure	HClO ₄	ClO ₄ ⁻	-9
Chlorwasserstoff	HCl	Cl ⁻	-6
Schwefelsäure	H ₂ SO ₄	HSO ₄ ⁻	-3
Hydroniumion	H ₃ O ⁺	H ₂ O	-1.74
Salpetersäure	HNO ₃	NO ₃ ⁻	-1.32
Hydrosulfation	HSO ₄ ⁻	SO ₄ ²⁻	1.92
Phosphorsäure	H ₃ PO ₄	H ₂ PO ₄ ⁻	1.96
Ameisensäure	HCOOH	HCOO ⁻	3.7
Essigsäure	CH ₃ COOH	CH ₃ COO ⁻	4.76
Kohlensäure	H ₂ CO ₃	HCO ₃ ⁻	6.46
Schwefelwasserstoff	H ₂ S	HS ⁻	7.06
Dihydrogenphosphation	H ₂ PO ₄ ⁻	HPO ₄ ²⁻	7.21
Ammoniumion	NH ₄ ⁺	NH ₃	9.21
Hydrogenkarbonation	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ²⁻	10.4
Hydrogenphosphation	HPO ₄ ²⁻	PO ₄ ³⁻	12.32
Hydrosulfidion	HS ⁻	S ²⁻	12.9
Wasser	H ₂ O	OH ⁻	15.74
Hydroxidion	OH ⁻	O ²⁻	24

5.2. pH-Berechnung von Pufferlösungen

5.2.1. Allgemein

$$\text{pH} = \text{pK}_S + \log\left(\frac{c(\text{PB})}{c(\text{PS})}\right)$$

$$\text{pOH} = \text{pK}_B + \log\left(\frac{c(\text{PS})}{c(\text{PB})}\right)$$

- pK_B = Negativer Logarithmus der Basekonstante K_B
- pK_S = Negativer Logarithmus der Säurekonstante K_S
- c(PS) = Konzentration Puffersäure in mol/l
- c(PB) = Konzentration Pufferbase in mol/l

5.2.2. Unter Einfluss von Säure

$$\text{pH} = \text{pK}_S + \log \left(\frac{c(\text{PB}) - c(\text{H}_3\text{O}^+)}{c(\text{PS}) + c(\text{H}_3\text{O}^+)} \right)$$

$c(\text{H}_3\text{O}^+)$ = Konzentration Säure in mol/l

5.2.3. Unter Einfluss von Base

$$\text{pH} = \text{pK}_S + \log \left(\frac{c(\text{PB}) + c(\text{OH}^-)}{c(\text{PS}) - c(\text{OH}^-)} \right)$$

$c(\text{OH}^-)$ = Konzentration Base in mol/l

6. Thermodynamik

6.1. Wärmekapazität C

Unter Wärmekapazität versteht man die Wärmemenge, die die Temperatur eines Körpers mit der Masse m um 1°C erhöht.

$$C = c_{\text{sp}} \cdot m$$

C	= Wärmekapazität	[J/K]
c_{sp}	= Spezifische Wärmekapazität	[J/g·K]
m	= Masse	[kg]

6.2. Enthalpie H

Den als Wärme ausgetauschten Anteil der Reaktionsenergie bezeichnet man als Reaktions-Enthalpie ΔH_{R} , auch Reaktionswärme oder Reaktionstönung genannt.

Bei Wärme**abgabe** (negatives Vorzeichen): **exotherme** Reaktion
 Bei Wärme**aufnahme** (positives Vorzeichen): **endotherme** Reaktion

$$\Delta H_{\text{R}}^{\circ} = \sum n \cdot \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{Produkte}) - \sum n \cdot \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{Edukte})$$

$\Delta H_{\text{R}}^{\circ}$	= Reaktions-Enthalpie	[kJ/mol]
$\Delta H_{\text{f}}^{\circ}$	= Bildungs-Enthalpie	[kJ/mol]

Allgemein



$$\Delta H_{\text{R}}^{\circ} = ((p \cdot \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{P})) + (q \cdot \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{Q}))) - ((a \cdot \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{A})) + (b \cdot \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{B})))$$

Ist $\Delta H_{\text{R}} < 0$ (exotherm), so läuft dieser Prozess tendenziell freiwillig ab (es braucht aber noch weitere Kriterien).

6.3. Entropie S

Die Entropie ist ein Mass für die Unordnung in einem System, je geringer die Ordnung in einem System ist, desto grösser ist seine Entropie.

Für eine gegebene Substanz ist immer:
 $S(\text{fest}) < S(\text{flüssig}) < S(\text{gasförmig})$

Berechnung der Reaktions-Entropie:

$$\Delta S_R^\circ = \sum n \cdot S(\text{Produkte}) - \sum n \cdot S(\text{Edukte})$$

$$\begin{aligned} \Delta S_R^\circ &= \text{Reaktions-Entropie} & [\text{J/mol}\cdot\text{K}] \\ S &= \text{Bildungs- Entropie} & [\text{J/mol}\cdot\text{K}] \end{aligned}$$

Für chemische Reaktionen gilt: positive Werte der Entropie zeigen, dass die entsprechende Reaktion freiwillig abläuft.

6.4. Freie Enthalpie G

6.4.1. Allgemein

Die freie Reaktions-Enthalpie ΔG entspricht demjenigen Anteil an der Enthalpie-Änderung ΔH , der maximal zur Arbeitsleistung frei verfügbar ist:

$$\Delta G = W_{\text{max}}$$

$$\Delta G_R^\circ = \sum n \cdot \Delta G_f^\circ(\text{Produkte}) - \sum n \cdot \Delta G_f^\circ(\text{Edukte})$$

$$\begin{aligned} \Delta G_R^\circ &= \text{Freie Reaktions-Entropie} & [\text{kJ/mol}] \\ \Delta G_f^\circ &= \text{Freie Bildungs- Entropie} & [\text{kJ/mol}] \end{aligned}$$

Interpretation von ΔG

- $\Delta G < 0$ (negative Werte) die Reaktion verläuft freiwillig.
- $\Delta G = 0$ die Reaktion befindet sich im Gleichgewicht.
- $\Delta G > 0$ (positive Werte) die Reaktion verläuft nicht freiwillig.

6.4.2. Temperatureinfluss

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

6.5. Beziehung zwischen chemischen Grössen

6.5.1. ΔG -Werte aus Gleichgewichtskonstanten K_C

$$\Delta G = -R \cdot T \cdot \ln(K_C)$$

mit $R = 8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$ (Gaskonstante)

$T = 298.16\text{K}$ (Temperatur 25°C)

$$\Delta G = -2.479 \cdot \ln(K_C) \quad \left[\frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right]$$

6.5.2. ΔG -Werte aus ΔE° -Werten galvanischer Zellen

$$\Delta G = -n \cdot F \cdot \Delta E^\circ$$

mit $n =$ Anzahl umgesetzter Elektronen e^-

$F = 96'487 \text{ As/mol } e^-$

6.5.3. ΔG° -Wert, ΔE° -Werte, K_C -Werte

$$\ln(K_C) = \frac{n \cdot F \cdot \Delta E^\circ}{R \cdot T}$$