

1 Stöchiometrie



Die Stöchiometrie dient der Berechnung von quantitativen Informationen, die aus einer Reaktionsgleichung gewonnen werden können. Sie beruht auf dem Massenerhaltungssatz, d.h. dass vor und nach einer chemischen Reaktion die Anzahl der Atome gleich ist. Die Stöchiometrie ist in der Schulchemie eines der Themen, die nicht bei allen Schülern beliebt ist. Dies liegt vermutlich daran, dass hier Mathematik benötigt wird. Zudem kommen mehrere physikalische Größen ins Spiel, die über physikalische Formeln miteinander verknüpft sind, wie die folgende Abbildung zeigt. Links die physikalischen bzw. chemischen Größen, rechts die Verknüpfung derselben:

m = Masse [g]. Die Klammer um [g] bedeutet, das als Einheit für die Masse das Symbol g für Gramm verwendet wird!

m_u = Masse eines Atoms in Atomeinheiten [u].

n = Stoffmenge [mol]

V = Volumen [l]

ρ = Dichte [g/cm³] bei Feststoffen und Flüssigkeiten, dagegen [g/l] bei Gasen, findet man in Tabellen.

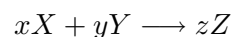
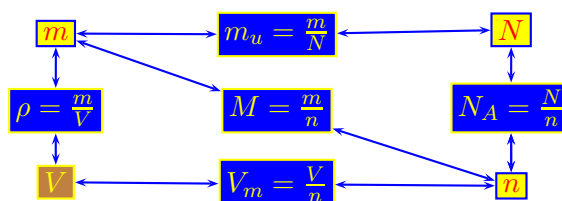
M = Molmasse [g/mol], findet man in Tabellen oder kann man selbst aus den Atommassen bestimmen.

V_m = Molvolumen [l/mol], bei idealen Gasen ist $V_m = 22,4$ l/mol ; bei Feststoffen und Flüssigkeiten sind die Werte unterschiedlich und nicht sinnvoll verwendbar.

N = Teilchenanzahl

N_A = Avogadrokonstante $6,022 \cdot 10^{23}$ [1/mol], die Einheit bedeutet Stück pro Mol.

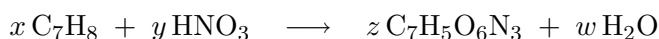
c = Konzentration [mol/l]



ist eine Reaktionsgleichung die angibt, dass x Teile vom Edukt X und y Teile vom Edukt Y zu z Teilen des Produkts Z reagieren. Teile kann sich sowohl auf einzelne Atome bzw. Moleküle, als auch auf die Stoffmenge, z.B. x Mol, beziehen.

Z.B.: Unter kontrollierten Bedingungen ergibt Toluol C_7H_8 und Salpetersäure HNO_3 das Produkt TNT (Trinitrotoluol) $C_7H_5O_6N_3$ und das Nebenprodukt Wasser.

Wie sind die Mischungsverhältnisse von Toluol und Salpetersäure? Hierzu wird ein Chemiker folgende Gleichung aufstellen:



Da es sich um eine chemische Reaktion (und nicht etwa um eine Kernreaktion) handelt, muss

die Anzahl der Atome der Elemente C, H, N und O vor und nach der Reaktion gleich sein. Mathematisch löst man also das LGS:

$$\begin{array}{ll}
 7x = 7z & \text{(Gleichung für C)} \\
 8x + 1y = 5z + 2w & \text{(Gleichung für H)} \\
 1y = 3z & \text{(Gleichung für N)} \\
 3y = 6z + 1w & \text{(Gleichung für O)}
 \end{array}$$

z.B. mit dem Gauß-Verfahren und folgender erweiterter Koeffizientenmatrix

$$\left(\begin{array}{cccc|c}
 0 & 7 & 0 & -7 & 0 \\
 -2 & 8 & 1 & -5 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & -3 & 0 \\
 -1 & 0 & 3 & -6 & 0
 \end{array} \right) \Leftrightarrow \left(\begin{array}{cccc|c}
 1 & 0 & 0 & -3 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & -3 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{array} \right)$$

Es gibt hier unendlich viele Lösungen. Natürlich ist das LGS nicht eindeutig lösbar, denn wir haben z.B. nicht fest gelegt, wie viele Moleküle TNT hergestellt werden. Insbesondere ist die triviale Lösung ($w = x = y = z = 0$) möglich, d.h. wir stellen am besten gar nichts von diesem Sprengstoff her. Chemisch ist die triviale mathematische Lösung uninteressant. Da brauchen wir ganzzahlige Lösungen $w, x, y, z \in \mathbb{N}$. Setzen wir nun also $z = 1$ und schauen, ob die anderen Koeffizienten w, x, y dann auch natürliche Zahlen sind:

$z = 1 \Rightarrow x = 1$ aus der Gleichung für C

$z = 1 \Rightarrow y = 3$ aus der Gleichung für N

$z = 1 \Rightarrow w = 3$ sieht man aus der umgeformten erweiterten Koeffizientenmatrix (nach Gauß-Verfahren).

Der Ansatz $z = 1$ gibt uns also bereits die kleinstmöglichen Koeffizienten der Reaktionsgleichung:

