Chemie, Grundwissen (LK Q3)

Chemisches Rechnen III: Thermodynamik und Kinetik

**Wichtige Größen**

**Q** (Wärme [J] ), Qp= H

**H** (Enthalpie [J/mol ]= Qp (Wärme bei konstantem Druck); (Standardbildungsenthalpie; s. Tabellenwerte, für Elemente = 0)

für Reaktionen gilt: ∆H>0: Die Reaktion verläuft endotherm

 ∆H<0: Die Reaktion verläuft exotherm

**C** (Wärmekapazität [J∙K-1∙mol-1] (Bei kalorimetrischen Berechnungen addieren sich die Wärmekapazitäten (z.B. die von Wasser und die des Kalorimeters)

**S** (Entropie [J∙K-1∙mol-1]; Definition: (Bei der Berechnung der Entropieänderung an Phasenübergängen entspricht Q der Schmelz- bzw Verdampfungsenthalpie und T der Schmelz- bzw. Siedetemperatur)

**T** (Temperatur [K]), **ϑ** Temperatur [°C]), Umrechnung T= ϑ + 273,15

**G** (freie Enthalpie; entspricht dem Anteil der Enthalpie, die bei reversibler Prozessführung frei wird und in andere Energieformen umgewandelt werden kann, d.h. nicht zur Entropieerhöhung verwendet wird)

für Reaktionen gilt: ∆G>0: Die Reaktion verläuft endergon (unfreiwillig)

 ∆G<0: Die Reaktion verläuft exergon (freiwillig)

**v** (Reaktionsgeschwindigkeit)

**k** (temperaturabhängige Geschwindigkeitskonstante)

**Wichtige Formeln**

Q = C∙∆T

**SATZ von HESS:** **Reaktionsenthalpie**:

Eingesetzt am Beispiel von aA + bB 🡪 cC + dD

∆r H° = c∙∆f H°(C) + d∙∆fH°(D) - a∙∆fH°(A) - b∙∆f H°(B)

 **Reaktionsentropie**:

**Gibbs-Helmholtz-Gleichung:** ∆G=∆H -T∙∆S (z.B. zur Berechnung des Temperaturbereichs, in dem die Reaktion exergon/endergon verläuft)

**Geschwindigkeitsgesetze:**

0. Ordnung: v=k

1. Ordnung: v= k∙c(A) oder v= k∙c(B)

2. Ordnung: v= k∙c(A)2 oder v= k∙c(B)2 oder v= k∙c(A) ∙c(B)

Chemie, Grundwissen (LK Q3)

Chemisches Rechnen IV: Chemisches Gleichgewicht

aA + bB ⇌ cC + dD

Im Gleichgewicht gilt: vhin= vrück und ∆G=0

**Massenwirkungsgesetz** (MWG): bzw. (für Gasreaktionen)

**Löslichkeitsprodukt** (gilt für gesättigte Salzlösungen AaBb(s) ⇌ aA+(aq) + bB- (aq) ) : KL= [A+]a∙ [B-]b

**Säure-Base-Reaktionen:**

HA(aq) + H2O(l) ⇌ A- (aq) + H3O+(aq) pKs=-lg Ks

B(aq) + H2O(l) ⇌ HB+(aq) + OH-(aq) pKB=-lg KB

für **korrespondierende Säure/Basen-Paare** gilt: pKs + pKB =14

**Ionenprodukt des Wassers**: KW= [H3O+(aq)] ∙ [OH-(aq)] = 10-14

pH= -lg [H3O+] pOH= -lg [OH-] pH + pOH= 14

**Berechnung von pH-Werten**

starke Säuren : pH = -lg c0 (HA) starke Basen: pOH= -lg [OH-] = -lg c0 (B)

schwache Säuren: schwache Basen:

Pufferlösungen (Henderson-Hasselbalchgleichung):

**Titration**

starke Säuren/Basen: ÄP=7, ansonsten lediglich Neutralisation und Volumenänderung beachten

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| schwache Säuren |  | schwache Basen |
|   | vor Titration |  |
| pH= pKs(Puffergleichgewicht, Verhältnis  | Halbäquivalenzpunkt | pOH= pKB(Puffergleichgewicht, Verhältnis  |
| B entspricht der korrespondierenden Base, mit n= Stoffmenge, der am Anfang vorhandenen Säure und V=Gesamtvolumen | Äquivalenzpunkt | HA entspricht der korrespondierenden Säure, mit n= Stoffmenge, der am Anfang vorhandenen Base und V=Gesamtvolumen |
| Nur noch die Konzentration der zugegebenen starken Base ist relevant. mit n= nach dem ÄP zugesetzte Stoffmenge der Base, V= Gesamtvolumen | nach dem ÄP bis End-pH-Wert | Nur noch die Konzentration der zugegebenen starken Säure ist relevant. mit n= nach dem ÄP zugesetzte Stoffmenge der Säure, V= Gesamtvolumen |