

## Formelübersicht Leistungskurs Chemietechnik

### Massenwirkungsgesetz

Für die Reaktion  $a A + b B \rightleftharpoons m M + n N$  gilt:  $a, b, m, n$ : stöchiometrische Faktoren

$$K_c = \frac{c^m(M) \cdot c^n(N)}{c^a(A) \cdot c^b(B)}$$

$$K_p = \frac{p^m(M) \cdot p^n(N)}{p^a(A) \cdot p^b(B)}$$

$K_c, K_p$ : Gleichgewichtskonstanten

$c$ : Stoffmengenkonzentration

$p$ : Partialdruck

Umrechnung von  $K_c$  in  $K_p$

$$K_p = K_c \cdot (R \cdot T)^{(m+n) - (a+b)}$$

$$R = 0,08314 \frac{\text{bar} \cdot \text{L}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

### Ideales Gasgesetz

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

### Protolysegleichgewichte

#### Ionenprodukt des Wassers

$$K_W = c(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot c(\text{OH}^-)$$

$$K_W = 1,0 \cdot 10^{-14} \frac{\text{mol}^2}{\text{L}^2}$$

$$\text{p}K_W = \text{pH} + \text{pOH}$$

$$\text{p}K_W = 14$$

pH-Wert und pOH-Wert

$$\text{pH} = -\lg c(\text{H}_3\text{O}^+) \quad ; \quad c(\text{H}_3\text{O}^+) = 10^{-\text{pH}}$$

$$\text{pOH} = -\lg c(\text{OH}^-) \quad ; \quad c(\text{OH}^-) = 10^{-\text{pOH}}$$

Konjugierte Säure-Base-Paare HA/A<sup>-</sup>

$$\text{p}K_S + \text{p}K_B = \text{p}K_W$$

#### Säurekonstante $K_S$

Für die Reaktion  $\text{HA} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{A}^-$  gilt:

$$K_S = \frac{c(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot c(\text{A}^-)}{c(\text{HA})}$$

$$\text{p}K_S = -\lg(K_S) \quad ; \quad K_S = 10^{-\text{p}K_S}$$

#### Basekonstante $K_B$

Für die Reaktion  $\text{B} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{HB}^+$  gilt:

$$K_B = \frac{c(\text{OH}^-) \cdot c(\text{HB}^+)}{c(\text{B})}$$

$$\text{p}K_B = -\lg(K_B) \quad ; \quad K_B = 10^{-\text{p}K_B}$$

**Protolysegleichgewichte (Fortsetzung)****pH- und pOH-Werte wässriger Lösungen**

sehr starke Säure oder Base

$$pK_{S,B} < -1,74$$

$$c(\text{H}_3\text{O}^+, \text{OH}^-) = c_0(\text{HA}, \text{B})$$

mittelstarke Säure oder Base

$$c(\text{H}_3\text{O}^+, \text{OH}^-) = \frac{-K_{S,B}}{2} + \sqrt{\left(\frac{K_{S,B}}{2}\right)^2 + K_{S,B} \cdot c_0(\text{HA}, \text{B})}$$

$$-1,74 \leq pK_{S,B} \leq 4,5$$

schwache Säure oder Base

$$4,5 \leq pK_{S,B} \leq 9,5$$

$$c(\text{H}_3\text{O}^+, \text{OH}^-) = \sqrt{K_{S,B} \cdot c_0(\text{HA}, \text{B})}$$

**Protolysegrad für Säuren und Basen**

$$\alpha = \frac{c(\text{HA})_{\text{protolysiert}}}{c_0(\text{HA})} = \frac{c(\text{H}_3\text{O}^+)}{c_0(\text{HA})}$$

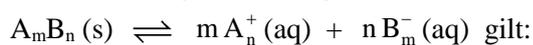
$$\alpha = \frac{c(\text{B})_{\text{protolysiert}}}{c_0(\text{B})} = \frac{c(\text{OH}^-)}{c_0(\text{B})}$$

**pH-Wert einer Pufferlösungen****(HENDERSON-HASSELBALCH-GLEICHUNG):**

$$\text{pH} = \text{p}K_S + \lg \frac{c(\text{A}^-)}{c(\text{HA})}$$

**Heterogene Gleichgewichte/Löslichkeitsprodukt**

Für des heterogene Gleichgewicht



$$K_L = c^m(\text{A}^{n+}) \cdot c^n(\text{B}^{m-})$$

 $K_L$ : Löslichkeitsprodukt

$$c(\text{A}_m\text{B}_n) = \sqrt[m+n]{\frac{K_L(\text{A}_m\text{B}_n)}{m^m \cdot n^n}}$$

**Elektrochemie****Zellspannung einer galvanischen Zelle**

$$\Delta E = E_{\text{Akzeptor-HZ}} - E_{\text{Donator-HZ}} \quad \text{oder}$$

$$\Delta E = E_{\text{Kathode}} - E_{\text{Anode}}$$

$\Delta E$ : Zellspannung

$E^0$ : Standardelektrodenpotenzial in V

$$\Delta E \geq 0 \text{ V}$$

**NERNST-Gleichung**

$$E = E_{\text{Red/Ox}}^0 + \frac{2,303 \cdot R \cdot T}{z \cdot F} \lg \frac{c(\text{Ox})}{c(\text{Red})}$$

$E$ : Elektrodenpotenzial in V

$E^0$ : Standardelektrodenpotenzial in V

$z$ : Zahl der ausgetauschten Elektronen pro Formelumsatz

$R$ : allg. Gaskonstante  $8,314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}}$

$F$ : FARADAY-Konstante  $96485 \frac{\text{A} \cdot \text{s}}{\text{mol}}$

$c(\text{Ox})$ : Stoffmengenkonzentration der oxidierten Form

$c(\text{Red})$ : Stoffmengenkonzentration der reduzierten Form

Für Standardtemperatur  $T = 25^\circ\text{C}$  gilt:

$$E = E_{\text{Red/Ox}}^0 + \frac{0,059 \text{ V}}{z} \lg \frac{c(\text{Ox})}{c(\text{Red})}$$

**Elektrolysespannung**

$$\Delta E_Z = (E_{\text{Kathode}} + E_{\text{Kathode}}^*) - (E_{\text{Anode}} + E_{\text{Anode}}^*)$$

$\Delta E_Z$ : Elektrolyse- oder Zersetzungsspannung

$E^*$ : Überspannungspotenzial

$$\Delta E_Z \leq 0 \text{ V}$$

**FARADAY-Gesetze**

$$n(\text{X}) = \frac{I \cdot t}{z \cdot F} = \frac{Q}{z \cdot F}$$

$n(\text{X})$ : abgeschiedene Stoffmenge

$I$ : Stromstärke in A

$t$ : Zeit in s

$Q$ : Ladung in  $\text{A} \cdot \text{s} = \text{C}$

$z$ : Zahl der ausgetauschten Elektronen pro Formelumsatz

$F$ : FARADAY-Konstante  $96485 (\text{A} \cdot \text{s})/\text{mol}$

**Freie molare Standardreaktionsenthalpie und Zellspannung bzw. Zersetzungsspannung**

$$\Delta_{\text{R}} G_{\text{m}}^0 = -z \cdot F \cdot \Delta E$$

$\Delta E$ : Zell- bzw. Zersetzungsspannung in V

$F$ : FARADAY-Konstante

$z$ : Zahl der ausgetauschten Elektronen pro Formelumsatz

$\Delta_{\text{R}} G_{\text{m}}^0$ : molare freie Standardreaktionsenthalpie

**Elektrische Größen****Elektrische Leistung**

$$P = \frac{W}{t}$$

$P$ : elektrische Leistung in  $V \cdot A = W$

**Elektrische Arbeit**

$$W = U \cdot I \cdot t$$

$W$ : elektrische Arbeit in  $V \cdot A \cdot s = W \cdot s$

$U$ : Spannung in V

**Energetik**

molare Standardreaktionsenthalpie

$$\Delta_R H_m^0 = \sum \Delta_f H_m^0(\text{Produkte}) - \sum \Delta_f H_m^0(\text{Edukte}) \quad \Delta_R H_m^0 \text{ in kJ/mol}$$

molare Standardreaktionsentropie

$$\Delta_R S_m^0 = \sum S_m^0(\text{Produkte}) - \sum S_m^0(\text{Edukte}) \quad \Delta_R S_m^0 \text{ in J/(K} \cdot \text{mol)}$$

molare freie Standardreaktionsenthalpie

$$\Delta_R G_m^0 = \Delta_R H_m^0 - T \cdot \Delta_R S_m^0$$

GIBBS-HELMHOLTZ-Gleichung

$$\Delta_R G_m^0 \text{ in kJ/mol}$$

**Zusammenhang zwischen  $\Delta_R G_m^0$  und  $K_c$** 

$$\Delta_R G_m^0 = -R \cdot T \cdot \ln K_c$$

$$\Delta_R G_m^0 = -2,303 \cdot R \cdot T \cdot \lg K_c$$

**Kalorimetrie**

$$Q = c(X) \cdot m(X) \cdot \Delta T$$

$Q$ : ausgetauschte Wärmemenge

$c(X)$ : spezifische Wärmekapazität  
in  $\text{kJ}/(\text{K} \cdot \text{kg})$

$$c(\text{H}_2\text{O}) = 4,19 \text{ kJ}/(\text{K} \cdot \text{kg})$$

## Gleichungen der Spektroskopie

$$\tau = \frac{I}{I_0}$$

$\tau$  : Transmission

$I$  : Intensität nach der Messzelle

$I_0$  : Intensität vor der Messzelle

$$E = \lg \frac{1}{\tau} = -\lg \tau$$

$E$  : Extinktion

(engl.: Absorbance, Formelsymbol: A)

$$\alpha = 1 - \tau$$

$\alpha$  : Absorption

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{\text{angeregter Zustand}} - E_{\text{Grundzustand}} \\ &= h \cdot f = \frac{h \cdot c}{\lambda} = h \cdot c \cdot \tilde{\nu} \end{aligned}$$

$\Delta E$ : Energie der absorbierten Strahlung

$h$ : PLANCKsches Wirkungsquantum

$6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

$c$ : Lichtgeschwindigkeit  $299792 \text{ km/s}$

$f$  oder  $\nu$  : Frequenz in  $\text{s}^{-1}$  ( $\text{s}^{-1} = 1 \text{ Hz}$ )

$\lambda$  : Wellenlänge in m

$\tilde{\nu}$  : Wellenzahl in  $\text{cm}^{-1}$

mit  $c = \lambda \cdot f$

und  $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$

## Gesetz von LAMBERT-BEER

$$E = \lg \frac{I_0}{I} = \varepsilon_{\text{mol}} \cdot d \cdot c(\text{X})$$

$\varepsilon_{\text{mol}}$ : molarer, dekadischer Extinktionskoeffizient

in  $\frac{\text{L}}{\text{cm} \cdot \text{mol}}$

$c(\text{X})$ : Analytkonzentration in mol/L

$d$ : Schichtdicke in cm

## Komplementärfarben

absorbierte Wellenlänge $\lambda$ in nm	absorbierte Farbe	Komplementärfarbe
400–440	violett	gelbgrün
440–480	blau	gelb
480–490	grünblau	orange
490–500	blaugrün	rot
500–560	grün	purpur
560–580	gelbgrün	violett
580–595	gelb	blau
595–605	orange	grünblau
605–750	rot	blaugrün
750–760	purpur	grün

## Charakteristische IR-Schwingungen

Bindung	Stoffklasse	Schwingungstyp	Wellenzahl [ $\text{cm}^{-1}$ ]	Intensität
C–H	Alkane	$\nu$	3000–2850	s
	–CH <sub>3</sub>	$\delta$	1450 und 1375	m
	–CH <sub>2</sub>	$\delta$	1465	m
	Alkene	$\nu$ oop	3100–3000 1000–650	m s
	Aromaten	$\nu$ oop	3150–3050 900–690	s s
	Alkine	$\nu$	3300	s
	Alkanale	$\nu$	2820–2720	w
C–C	Alkane	nicht sinnvoll zu interpretieren		
C=C	Alkene	$\nu$	1680–1600	m–w
	Aromaten	$\nu$ OS, KS „Benzolfinger“	1600 und 1475 2000–1650	m–w w
C≡C	Alkine	$\nu$	2250–2100	m–w
C=O	Alkanale	$\nu$	1740–1720	s
	Alkanone	$\nu$	1725–1705	s
	Carbonsäuren	$\nu$	1725–1700	s
	Ester	$\nu$	1750–1730	s
	Anhydride	$\nu$	1810 und 1760	s
	Säurechloride	$\nu$	1800	s
C–O	Alkohole, Ether, Ester, Carbonsäuren	$\nu$	1300–1000	s
O–H	Alkohole, Phenole frei	$\nu$	3650–3600	m
	Wasserstoffbrücken	$\nu$	3500–3200	m
	Carbonsäuren	$\nu$	3400–2400	m
N–H	Amine, Amide	$\nu$	3500–3300	m
N=O	Nitroverbindungen	$\nu$	1550 und 1350	s
C–X	Fluoride	$\nu$	1400–1000	s
	Chloride	$\nu$	800–600	s

Legende: oop: out-of-Plane-Schwingung, s: stark (strong), m: mittel (medium), w: schwach (weak)  
 $\nu$ : Valenzschwingung,  $\delta$ : Deformationsschwingung, OS Oberschwingung, KS Kombinationsschwingung

**Kenngrößen der Chromatografie**

Reduzierte Retentionszeit (Nettoretentionszeit)

$$t'_R = t_R - t_M$$

 $t'_R$ : reduzierte Retentionszeit $t_R$ : Retentionszeit des Analyten  
(Bruttoretentionszeit)

Retentionsfaktor

$$k = \frac{n_S}{n_m} = \frac{t_R - t_M}{t_M} = \frac{t'_R}{t_M}$$

 $k$ : Retentionsfaktor eines Analyten $n_S$ : Stoffmenge Analyt in der stat. Phase $n_m$ : Stoffmenge Analyt in der mobilen Phase

Trennfaktor (Selektivität)

$$\alpha = \frac{t'_{R2}}{t'_{R1}} = \frac{k_2}{k_1}$$

 $\alpha$ : Trennfaktor

Peakauflösung

$$R_S = \frac{2 \cdot (t_{R2} - t_{R1})}{w_{b1} + w_{b2}} = \frac{1,177 \cdot (t_{R2} - t_{R1})}{w_{h1} + w_{h2}}$$

 $R_S$ : Peakauflösung $w_b$ : Peakbreite an der Basis $w_h$ : Peakbreite auf halber Höhe (auch  $w_{\frac{1}{2}}$ )

Trennstufenzahl (Bodenzahl)

$$N = \frac{L}{H} = 16 \cdot \left( \frac{t_R}{w_b} \right)^2 = 5,545 \cdot \left( \frac{t_R}{w_h} \right)^2$$

 $N$ : Trennstufenzahl $H$ : theoretische Bodenhöhe $L$ : Länge der Säule**Quantitative Bestimmung mit internem Standard**

$$K_F = \frac{A_{IST} \cdot m_{STD}}{A_{STD} \cdot m_{IST}}$$

 $K_F$ : Methodenfaktor $A_{IST}$ : Fläche des internen Standards $A_{STD}$ : Fläche des Standards (Analyt) $m_{STD}$ : Masse des Standards (Analyt) $m_{IST}$ : Masse des internen Standards

$$m_{Analyt} = \frac{K_F \cdot A_{Analyt} \cdot m_{ISTP}}{A_{ISTP}}$$

 $m_{Analyt}$ : Masse des Analyten in der Probe $A_{Analyt}$ : Fläche des Analyten in der Probe $m_{ISTP}$ : Masse des internen Standards in der Probe $A_{ISTP}$ : Fläche des internen Standards in der Probe

**Statistische Kenngrößen**

arithmetischer Mittelwert

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n}$$

 $\bar{x}$ : arithmetischer Mittelwert $x_i$ : Messwert $n$ : Anzahl der Messungen

Variationsbreite (Spannweite)

$$R = x_{\max} - x_{\min}$$

 $R$ : Variationsbreite

Standardabweichung und Varianz

$$s = \pm \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \quad \text{und} \quad s^2 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n-1}$$

 $s$ : Standardabweichung $s^2$ : Varianz

Variationskoeffizient

$$v = \frac{s}{\bar{x}}$$

 $v$ : Variationskoeffizient**Statistische Prüfverfahren**

Ausreißertest nach GRUBBS

$$PG = \frac{|x^* - \bar{x}|}{s}$$

 $PG$ : Prüfgröße $x^*$ : ausreißerverdächtiger Messwert

Es gelten die folgenden Kriterien:

$$PG < P(90 \%)$$

kein Ausreißer

$$P(90 \%) \leq PG < P(95 \%)$$

wahrscheinlich ein Ausreißer

$$P(95 \%) \leq PG < P(99 \%)$$

signifikanter Ausreißer

$$PG \geq P(99 \%)$$

hochsignifikanter Ausreißer

**Tabelle: GRUBBS-Test**

n-Messwerte	$P = 90 \%$	$P = 95 \%$	$P = 99 \%$
3	1,148	1,153	1,155
4	1,425	1,463	1,492
5	1,602	1,672	1,749
6	1,729	1,822	1,944
7	1,828	1,938	2,097
8	1,909	2,032	2,221
9	1,977	2,110	2,323
10	2,036	2,176	2,410
11	2,088	2,234	2,485

geändert nach: Stavros Kromidas: Validierung in der Analytik, Weinheim 2002, S. 256.