

INHALT, BEGRIFFE, FORMELN

Chemisches Gleichgewicht, MWG, Kinetik und industrielle Verfahren

1. Chemisches Gleichgewicht – Grundlagen

- Dynamisches Gleichgewicht
- Hin- und Rückreaktion laufen gleichzeitig ab
- Gleichgewicht im geschlossenen System
- Bedeutung des Doppelpfeils (\rightleftharpoons)
- Lage des Gleichgewichts (Edukt-/Produktseite)

2. Prinzip von Le Chatelier

- System reagiert auf äußere Störungen
- Einfluss von Temperatur
- Einfluss von Druck
- Einfluss von Konzentration
- Verschiebung des Gleichgewichts erklären
- Zusammenhang zwischen Störung und Gegenreaktion

3. Exotherme und endotherme Reaktionen

- $\Delta H < 0 \rightarrow$ exotherm
- $\Delta H > 0 \rightarrow$ endotherm
- Wärme als „Produkt“ oder „Edukt“ betrachten
- Einfluss der Temperatur auf das Gleichgewicht
- Bedeutung für industrielle Prozesse

4. Reaktionsenthalpie und Hess'scher Satz

- Berechnung von ΔH_r°
- Produkte minus Edukte
- Standardbildungsenthalpien verwenden
- Elemente im Standardzustand: $\Delta H_f^\circ = 0$
- Interpretation des Vorzeichens

5. Stoffmenge und Gasrechnung

- $n = m / M$
- $n = V / V_m$
- Molvolumen unter Normbedingungen
- Umrechnung zwischen Masse, Volumen und Stoffmenge
- Stöchiometrisches Rechnen

6. Wärmeenergie und Energiebilanz

- $Q = n \cdot \Delta H$
- Exotherme Prozesse geben Wärme ab
- Endotherme Prozesse benötigen Wärme
- Energie pro Zeiteinheit berechnen
- Bedeutung von Wärmetauschern und Kühlung

7. Massenwirkungsgesetz (MWG)

- Aufstellen von K_c - und K_p -Ausdrücken
- Produkte im Zähler, Edukte im Nenner
- Stöchiometrische Koeffizienten als Exponenten
- Unterschied zwischen K_c und K_p
- Gleichgewichtskonstante interpretieren
- $K \gg 1 \rightarrow$ Produktseite bevorzugt

8. Chemische Gleichgewichtskonstante

- Bedeutung von K
- Zusammenhang zwischen K und Gleichgewichtslage
- Einfluss der Temperatur auf K
- Große und kleine K -Werte deuten
- Thermodynamische Bedeutung des Gleichgewichts

9. Reaktionskinetik

- Reaktionsgeschwindigkeit als kinetische Größe
- Einfluss der Temperatur auf die Geschwindigkeit
- Aktivierungsenergie E_a
- Maxwell-Boltzmann-Verteilung
- Teilchenbewegung und Stoßtheorie
- Konzentration und Oberfläche als Einflussfaktoren
- Mittlere und momentane Reaktionsgeschwindigkeit

10. Katalyse

- Funktion eines Katalysators
- Senkung der Aktivierungsenergie
- Alternativer Reaktionsweg
- Heterogene Katalyse an Oberflächen
- Adsorption, Reaktion und Desorption
- Katalysator verändert Gleichgewichtslage nicht
- Beschleunigung von Hin- und Rückreaktion

11. Kinetik vs. Thermodynamik

- Reaktionsgeschwindigkeit = kinetische Größe
- Gleichgewicht = thermodynamische Größe
- Unterschied zwischen Geschwindigkeit und Endzustand
- Einfluss der Temperatur auf beide Bereiche
- Einfluss des Katalysators

12. Industrielle Prozessführung

- Kompromiss zwischen Ausbeute und Geschwindigkeit
- Temperaturwahl in Industrieprozessen
- Druckwahl bei Gasgleichgewichten
- Kontinuierliche Produktentnahme
- Wärmemanagement und Energierückgewinnung
- Wirtschaftlichkeit chemischer Prozesse
- Sicherheits- und Umweltaspekte

13. Ostwald-Verfahren

- Herstellung von Salpetersäure
- Oxidation von Ammoniak
- Pt/Rh-Katalysator
- Exothermer Prozess
- Zusammenhang mit Gleichgewicht und Kinetik
- Bedeutung für Düngemittel und Sprengstoffe

14. Deacon-Prozess

- Herstellung von Chlor aus HCl
- Oxidation mit Sauerstoff
- CuCl_2 -Katalysator
- Einfluss von Temperatur und Druck
- Chlor-Recycling in der Industrie
- Ressourceneffizienz

15. Kontaktverfahren

- Herstellung von Schwefelsäure
- Oxidation von SO_2 zu SO_3
- V_2O_5 -Katalysator
- Exotherme Gleichgewichtsreaktion
- Industrieller Temperaturkompromiss
- Bedeutung von Oleum und Absorption

16. Steam-Reforming

- Industrielle Wasserstoffherstellung
- Endothermer Prozess
- Hohe Temperaturen notwendig
- Nickel-Katalysator
- Wassergas-Shift-Reaktion
- Bedeutung für Ammoniaksynthese und Energiewirtschaft

17. Haber-Bosch-Verfahren

- Ammoniaksynthese aus N_2 und H_2
- Exotherme Reaktion
- Einfluss von Druck und Temperatur
- Eisen-Mischkatalysator
- Rückführung der Edukte
- NH_3 -Kondensation
- Bedeutung für Düngemittelproduktion

18. Historischer und gesellschaftlicher Kontext

- „Brot aus Luft“
- Fritz Haber und Carl Bosch
- BASF und Hochdrucktechnik
- Bedeutung für Welternährung
- Nutzung in Landwirtschaft und Industrie
- Ambivalenz: Düngemittel und Kriegsindustrie

19. Methodische Kompetenzen

- Vollständige Rechenwege darstellen
- Fachsprache korrekt verwenden
- Gleichgewichte analysieren
- Reaktionsgleichungen interpretieren
- Diagramme und Tabellen auswerten
- Chemische Prozesse begründen
- Theorie auf Industrieprozesse übertragen

BEGRIFFE:

1. Chemisches Gleichgewicht

- chemisches Gleichgewicht
- dynamisches Gleichgewicht
- Hinreaktion
- Rückreaktion
- reversible Reaktion
- Gleichgewichtslage
- Gleichgewichtseinstellung
- geschlossenes System
- Edukte
- Produkte

2. Prinzip von Le Chatelier

- Störung des Gleichgewichts
- Gleichgewichtsverschiebung
- Temperaturänderung
- Druckänderung
- Konzentrationsänderung
- Produktentnahme
- Eduktzugabe
- Anpassung des Systems

3. Thermodynamik

- exotherme Reaktion
- endotherme Reaktion
- Reaktionsenthalpie ΔH
- Standardenthalpie
- Wärmeabgabe
- Wärmezufuhr
- Energieumsatz
- Hess'scher Satz
- thermodynamische Begünstigung

4. Massenwirkungsgesetz (MWG)

- Massenwirkungsgesetz
- Gleichgewichtsausdruck
- Gleichgewichtskonstante
- K_c
- K_p
- Reaktionsquotient Q
- Stoffmengenkonzentration
- Partialdruck
- stöchiometrische Koeffizienten

5. Interpretation von K

- Produktseite bevorzugt
- Eduktseite bevorzugt
- hohe Ausbeute
- geringe Ausbeute
- Temperaturabhängigkeit von K
- Gleichgewichtslage interpretieren

6. Reaktionskinetik

- Reaktionskinetik
- Reaktionsgeschwindigkeit
- Reaktionsrate
- Geschwindigkeitsänderung
- schnelle Reaktion
- langsame Reaktion
- mittlere Geschwindigkeit
- momentane Geschwindigkeit

7. Stoßtheorie und Teilchenmodell

- Stoßtheorie
- wirksamer Stoß
- Teilchenbewegung
- Kollisionshäufigkeit
- kinetische Energie
- Teilchenenergie

8. Aktivierungsenergie

- Aktivierungsenergie E_a
- Energiebarriere
- Mindestenergie
- aktivierter Komplex
- Übergangszustand
- Arrhenius-Gleichung
- RGT-Regel

9. Maxwell-Boltzmann-Verteilung

- Energieverteilung
- reaktionsfähige Teilchen
- Temperaturabhängigkeit
- Teilchen mit ausreichender Energie

10. Einflussfaktoren auf die Reaktionsgeschwindigkeit

- Temperatur
- Konzentration
- Druck
- Oberfläche
- Teilchendichte
- Oberflächenvergrößerung

11. Katalyse

- Katalysator
- Reaktionsbeschleunigung
- Senkung der Aktivierungsenergie
- alternativer Reaktionsweg
- heterogene Katalyse
- homogene Katalyse
- Adsorption
- Desorption
- aktive Zentren

12. Kinetik und Thermodynamik

- kinetische Kontrolle
- thermodynamische Kontrolle
- Reaktionsweg
- Endzustand
- Gleichgewichtslage
- Reaktionsgeschwindigkeit

13. Diagramme und Auswertung

- Konzentrationsdiagramm
- Geschwindigkeitsdiagramm
- Energiediagramm
- Steigung
- Tangente
- Sekante
- Kurvenverlauf

14. Industrielle Prozessführung

- Kompromissbedingungen
- Prozessoptimierung
- Gleichgewichtsausbeute
- Wärmemanagement
- Wärmerückgewinnung
- Produktabtrennung
- Kreislaufprozess
- Durchsatz
- Energieeffizienz
- Betriebskosten

FORMELSAMMLUNG CHEMISCHES GLEICHGEWICHT, MWG, KINETIK UND THERMODYNAMIK

Formel Bedeutung

$n = m / M$ Stoffmenge aus Masse und molarer Masse

$m = n \cdot M$ Masse aus Stoffmenge und molarer Masse

$M = m / n$ molare Masse aus Masse und Stoffmenge

$n = V / V_m$ Stoffmenge eines Gases aus Volumen und Molvolumen

$V = n \cdot V_m$ Gasvolumen aus Stoffmenge und Molvolumen

$V_m = V / n$ Molvolumen aus Volumen und Stoffmenge

$N = n \cdot N_a$ Teilchenzahl aus Stoffmenge

$n = N / N_a$ Stoffmenge aus Teilchenzahl

$c = n / V$ Stoffmengenkonzentration

$n = c \cdot V$ Stoffmenge aus Konzentration und Volumen

$V = n / c$ Volumen aus Stoffmenge und Konzentration

STÖCHIOMETRIE

Formel Bedeutung

$n(A) / \nu(A) = n(B) / \nu(B)$ Stoffmengenverhältnis nach Reaktionsgleichung

$n(B) = n(A) \cdot \nu(B) / \nu(A)$ Berechnung einer gesuchten Stoffmenge

$m(B) = n(B) \cdot M(B)$ Berechnung der Masse eines Stoffes

$V(B) = n(B) \cdot V_m$ Berechnung des Gasvolumens

ν Stöchiometrischer Koeffizient

IDEALES GAS UND PARTIALDRUCK

Formel Bedeutung

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

$p = n \cdot R \cdot T / V$ Druck eines Gases

$V = n \cdot R \cdot T / p$ Volumen eines Gases

$n = p \cdot V / (R \cdot T)$ Stoffmenge eines Gases

$T(K) = T(^{\circ}C) + 273,15$ Umrechnung von Celsius in Kelvin

$p_i = x_i \cdot p(\text{gesamt})$ Partialdruck eines Gases

$x_i = n_i / n(\text{gesamt})$ Stoffmengenanteil

$p(\text{gesamt}) = p_1 + p_2 + p_3 + \dots$ Gesamtdruck

CHEMISCHES GLEICHGEWICHT

Formel Bedeutung

$v_h = v_r$ Bedingung des dynamischen Gleichgewichts

$K = \text{Produkte} / \text{Edukte}$ allgemeine Bedeutung der Gleichgewichtskonstante

$K > 1$ Produkte überwiegen

$K < 1$ Edukte überwiegen

$K \approx 1$ ähnliche Mengen von Edukten und Produkten

MASSENWIRKUNGSGESETZ MIT KONZENTRATIONEN

Formel Bedeutung

$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$ allgemeine Gleichgewichtsreaktion

$K_c = c(C)^c \cdot c(D)^d / [c(A)^a \cdot c(B)^b]$ MWG mit Konzentrationen

$c(A)$ Konzentration des Stoffes A

a, b, c, d Stöchiometrische Koeffizienten

K_c Gleichgewichtskonstante mit Konzentrationen

MASSENWIRKUNGSGESETZ MIT PARTIALDRÜCKEN

Formel Bedeutung

$$K_p = \frac{p(C)^c \cdot p(D)^d}{[p(A)^a \cdot p(B)^b]}$$
 MWG mit Partialdrücken

$p(A)$ Partialdruck des Stoffes A

K_p Gleichgewichtskonstante mit Partialdrücken

$$K_p = K_c \cdot (R \cdot T)^{\Delta n}$$
 Zusammenhang zwischen K_p und K_c

$\Delta n = \sum v(\text{Produkte}) - \sum v(\text{Edukte})$ Änderung der Stoffmenge gasförmiger Teilchen

REAKTIONSQUOTIENT

Formel Bedeutung

$Q = \frac{\text{aktueller Produktterm}}{\text{aktueller Eduktterm}}$ aktueller Zustand des Systems

$Q < K$ Hinreaktion bevorzugt

$Q > K$ Rückreaktion bevorzugt

$Q = K$ System im Gleichgewicht

REAKTIONSENTHALPIE UND HESS'SCHER SATZ

Formel Bedeutung

$$\Delta H_r^\circ = \sum \Delta H_f^\circ(\text{Produkte}) - \sum \Delta H_f^\circ(\text{Edukte})$$
 Standardreaktionsenthalpie

$$\Delta H_r^\circ = \sum v \cdot \Delta H_f^\circ(\text{Produkte}) - \sum v \cdot \Delta H_f^\circ(\text{Edukte})$$
 Formel mit Koeffizienten

$\Delta H < 0$ exotherme Reaktion

$\Delta H > 0$ endotherme Reaktion

$\Delta H_f^\circ(\text{Element}) = 0$ Element im Standardzustand

$$Q = n \cdot \Delta H$$
 Wärmeenergie

$Q < 0$ Wärme wird abgegeben

$Q > 0$ Wärme wird aufgenommen

$\Delta H \text{ pro mol} = \Delta H_r^\circ / v$ Umrechnung auf ein Mol

REAKTIONSGESCHWINDIGKEIT

Formel Bedeutung

$$v = \frac{\Delta c}{\Delta t}$$
 Reaktionsgeschwindigkeit über Konzentration

$$v = \frac{\Delta p}{\Delta t}$$
 Reaktionsgeschwindigkeit über Druck

$$\bar{v} = \frac{(c_2 - c_1)}{(t_2 - t_1)}$$
 mittlere Reaktionsgeschwindigkeit

$$\bar{v} = \frac{(p_2 - p_1)}{(t_2 - t_1)}$$
 mittlere Geschwindigkeit mit Druck

$$v = \frac{dc}{dt}$$
 momentane Geschwindigkeit

$$v = \frac{dp}{dt}$$
 momentane Geschwindigkeit mit Druck

$$v = -\frac{\Delta c(\text{Edukt})}{\Delta t}$$
 Abnahme eines Eduktes

$$v = \frac{\Delta c(\text{Produkt})}{\Delta t}$$
 Zunahme eines Produktes

REAKTIONSGESCHWINDIGKEIT MIT STÖCHIOMETRIE

Formel Bedeutung

$$v = -\frac{1}{a} \cdot \frac{\Delta c(A)}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \cdot \frac{\Delta c(B)}{\Delta t} = \frac{1}{c} \cdot \frac{\Delta c(C)}{\Delta t} = \frac{1}{d} \cdot \frac{\Delta c(D)}{\Delta t}$$
 einheitliche

Reaktionsgeschwindigkeit $-\frac{\Delta c(\text{Edukt})}{\Delta t}$ Eduktkonzentration sinkt

$\frac{\Delta c(\text{Produkt})}{\Delta t}$ Produktkonzentration steigt

$1/v$ Korrektur durch Koeffizienten

GESCHWINDIGKEITSGESETZ

Formel Bedeutung

$$v = k \cdot c(A)^m \cdot c(B)^n$$
 allgemeines Geschwindigkeitsgesetz

k Geschwindigkeitskonstante

m, n Reaktionsordnungen

$m + n$ Gesamtordnung

$$v = k \cdot c(A)$$
 Reaktion 1. Ordnung

$$v = k \cdot c(A)^2$$
 Reaktion 2. Ordnung

$$v = k$$
 Reaktion 0. Ordnung

ARRHENIUS-GLEICHUNG

Formel Bedeutung

$k = A \cdot e^{-E_a/RT}$ Arrhenius-Gleichung

$\ln(k) = \ln(A) - E_a / (R \cdot T)$ linearisierte Form

E_a Aktivierungsenergie

A Frequenzfaktor

R allgemeine Gaskonstante

T Temperatur in Kelvin

$e^{-E_a/RT}$ Anteil reaktionsfähiger Teilchen

höheres T größeres k

kleineres E_a schnellere Reaktion

RGT-REGEL

Formel Bedeutung

$v_2 \approx v_1 \cdot \gamma \Delta T^{10}$ Geschwindigkeitsänderung bei Temperaturänderung

γ Temperaturkoeffizient

ΔT Temperaturänderung

+10 °C Geschwindigkeit steigt etwa auf das 2- bis 4-Fache

-10 °C Geschwindigkeit sinkt deutlich

MAXWELL-BOLTZMANN-VERTEILUNG

Formel Bedeutung

$E \geq E_a$ Teilchen können reagieren

$E < E_a$ Teilchen reagieren nicht

höheres T mehr Teilchen besitzen $E \geq E_a$

Katalysator E_a wird kleiner

KATALYSE

Formel Bedeutung

$E_{a,kat} < E_{a,unkat}$ Katalysator senkt Aktivierungsenergie

$v_{kat} > v_{unkat}$ katalysierte Reaktion läuft schneller

K bleibt gleich Gleichgewichtslage bleibt unverändert

v_h und v_r steigen Hin- und Rückreaktion werden beschleunigt

$K = k_h / k_r$ Zusammenhang von K und Geschwindigkeitskonstanten

k_h Geschwindigkeitskonstante der Hinreaktion

k_r Geschwindigkeitskonstante der Rückreaktion

LE CHATELIER UND TEMPERATUR

Formel Bedeutung $\Delta H < 0$ exotherme Reaktion $\Delta H > 0$ endotherme Reaktion

Temperaturerhöhung bei exothermer Reaktion Gleichgewicht verschiebt sich thermodynamisch zur Eduktseite

Temperaturerhöhung bei endothermer Reaktion Gleichgewicht verschiebt sich thermodynamisch zur Produktseite

Temperatursenkung bei exothermer Reaktion Produktbildung wird begünstigt

Temperatursenkung bei endothermer Reaktion Produktbildung wird gehemmt

DRUCK UND GASGLEICHGEWICHT

Formel Bedeutung

$\Delta n < 0$ Produktseite besitzt weniger Gasteilchen

$\Delta n > 0$ Produktseite besitzt mehr Gasteilchen

$\Delta n = 0$ Druckänderung hat kaum Einfluss

Druckerhöhung Seite mit weniger Gasteilchen wird begünstigt

Druckerniedrigung Seite mit mehr Gasteilchen wird begünstigt

AUSBEUTE UND UMSATZ

Formel Bedeutung

Ausbeute = tatsächliche Produktmenge / theoretische Produktmenge tatsächliche Produktausbeute

Ausbeute in % = tatsächliche Produktmenge / theoretische Produktmenge · 100 % prozentuale Ausbeute

Umsatz = umgesetzte Eduktmenge / eingesetzte Eduktmenge Anteil des verbrauchten Eduktes

Umsatz in % = umgesetzte Eduktmenge / eingesetzte Eduktmenge · 100 % prozentualer Umsatz

INDUSTRIELLE PROZESSFÜHRUNG

Formel Bedeutung

Durchsatz = Stoffmenge / Zeit Stoffmenge pro Zeit

$P = E / t$ Leistung

Q / t Wärmeleistung

$\eta = \text{Nutzenergie} / \text{zugeführte Energie}$ Wirkungsgrad

η in % = Nutzenergie / zugeführte Energie · 100 % prozentualer Wirkungsgrad

hohe Geschwindigkeit + günstige Gleichgewichtslage Ziel industrieller Prozessoptimierung