
Rechnen in Chemie und Pharmazie

Karl-Franzens-Universität Graz

2006

Ernst Haslinger

1 Größen und Einheiten

1.1 Physikalische Größen

Physikalische Größen sind messbare Merkmale physikalischer Systeme (Dinge, Zustände, Vorgänge).

Dinge: z.B. Stoffportionen; Zustände: durch Größenwerte festgelegte Eigenschaften von Systemen (wie Temperatur, Druck, usw.); Vorgänge: z.B. Aussendung von Strahlung.

Betrachtet man nur die Qualität einer Größe bezeichnet man sie auch als Größenart.

So sind z. B.: Druck, Temperatur, Masse, Konzentration, Stoffmenge, Stromstärke, usw. jeweils eine Größenart.

Physikalische Gesetzmäßigkeiten sind mathematische Verknüpfungen solcher Größen.

Um alle messbaren Eigenschaften von Systemen zu beschreiben, benötigt man eine Anzahl voneinander unabhängiger Größen, die zusammen ein Größensystem ergeben.

In der Physik werden 7 Basisgrößen verwendet und aus diesen durch mathematische Verknüpfungen alle anderen abgeleitet.

1.1.1 Basisgrößen:

Die **Basisgrößen** sind:

Länge
Zeit
Masse
thermodynamische Temperatur
elektrische Stromstärke
Stoffmenge
Lichtstärke

1.1.2 Abgeleitete Größenarten:

Aus den Basisgrößen lassen sich alle weiteren Größenarten als Produkte oder Quotienten der Basisgrößen ableiten.

Z. B.: Geschwindigkeit = Länge/Zeit;

Volumen = Länge³;

Dichte = Masse/Volumen;

Ladung = Stromstärke × Zeit usw.

1.1.3 Formelzeichen:

Besonders in Gleichungen, Tabellen oder graphischen Darstellungen werden physikalische Größenarten durch Symbole (Formelzeichen) dargestellt. Als Formelzeichen werden Buchstaben des lateinischen und des griechischen Alphabets in *kursivem* Druck verwendet.

Basisgrößenart	Dimensionszeichen	Formelzeichen	Einheit
Länge	L	<i>l</i>	Meter m
Zeit	T	<i>t</i>	Sekunde s
Masse	M	<i>m</i>	Kilogramm kg
elektrische Stromstärke	I	<i>I</i>	Ampere A
thermodynamische Temperatur	T	<i>T</i>	Kelvin K
Stoffmenge	N	<i>n</i>	Mol mol
Lichtstärke	J	<i>I_v</i>	Candela cd

1.1.4 Dimension:

Die Dimension einer Größe zeigt den Zusammenhang mit den Basisgrößen an. Sie ist das Potenzprodukt der Dimensionszeichen der Basisgrößenarten. Als Dimensionszeichen werden senkrechte lateinische oder griechische Großbuchstaben verwendet.

Beispiele für abgeleitete Größenarten:

Demnach lautet die Dimension der Geschwindigkeit: (Länge/Zeit): $\dim v = LT^{-1}$.

Die Dimension der Beschleunigung (Änderung der Geschwindigkeit pro Zeiteinheit):

$\dim a = LT^{-2}$.

Fläche: $\dim A = L^2$.

Kraft (= Masse \times Beschleunigung): $\dim F = M \times L \times T^{-2}$ Einheit: = kg m s⁻².

Dichte: (= Masse / Volumen): $\dim \rho = M \times L^{-3}$ Einheit: = g cm⁻³

1.1.5. Größenwert:

Mit der Größenart allein erhält man noch keine quantitativen Aussagen über ein System. Erst wenn man einen Wert der Größe als Einheit festlegt, kann man fragen, wie lang ein Objekt ist, wie viel von einem Stoff vorhanden ist, wie lange etwas dauert usw.

Diesen numerischen Wert einer physikalischen Größe bezeichnet man als Größenwert (meist kurz als Größe). Er ist das Produkt aus einem Zahlenwert und der Einheit dieser Größe.

Wert der Größe = Zahlenwert \times Einheit

z. B.: Zeit = 5 Sekunden (der gemessene Zeitwert ist das 5fache einer Sekunde)

 Länge = 12 Meter (der gemessene Wert ist das 12fache eines Meters)

Allgemein: Größe = Zahlenwert \times Einheit oder in Symbolen: $G = \{G\} \times [G]$
 $\{G\}$ ein Symbol in einer geschweiften Klammer bedeutet den Zahlenwert der Größe G .
 $[G]$ ein Symbol in einer eckigen Klammer bedeutet die Einheit der Größe G .

Beispiel:

Masse = $\{m\} \times [m]$; $m = 135$ g;
 $\{m\} = 135$: Zahlenwert der Masse, $[m] = \text{g}$: Einheit der Masse.

1.1.6. Größengleichungen:

Wenn man zwischen den Werten zweier Größenarten einen mathematischen Zusammenhang herstellen und durch eine daraus resultierende Größe dokumentieren kann, spricht man von einer **Größengleichung**.

So wird z.B. die **Geschwindigkeit** v (kursives v) als Quotient aus Weglänge und der Zeitdauer: $v = s/t$ oder die **Dichte** ρ (griech. rho) als Masse durch Volumen $\rho = m/V$ festgelegt.

Ist der Werte von zweien der drei Größen bekannt, kann man die dritte Größe berechnen.

Für stöchiometrische Berechnungen sollte man vorwiegend Größengleichungen heranziehen.

2 Chemische Grundrechnungen

Obwohl heute in der Chemie Bezeichnungen wie „Gewichtsprozent“, „Volumenprozent“, „Prozentgehalt“ usw. nicht mehr üblich sind, werden diese Ausdrücke dennoch in den Arzneibüchern verwendet. Dies ist der Grund, warum sie hier ebenfalls Verwendung finden.

2.1 Relative Atom- und Molekülmasse

2.1.1 Chemische Formeln

Einen abgegrenzten Materiebereich, der aus einem oder mehreren Stoffen besteht, nennt man **Stoffportion**. Seine Quantität („Größe“ der Stoffportion im Sinne von Teilchenanzahl) wird durch die Größen Masse m , Volumen V und Stoffmenge n angegeben.

Beispiel:

Stoffportionen sind: 1 Liter Wasserstoff, ein Goldbarren von 10 g, 2 kg Schwefel, usw.

Durch Zerkleinern eines Stoffes auf mechanischem Wege (z.B.: Zerstoßen, Auflösen, Verdampfen usw.) ist es möglich, ihn in kleinste Teilchen zu zerlegen. Diese sind in physikalischem Sinn unteilbar und die kleinsten Einheiten des Stoffes. Man nennt sie Moleküle. Diese können nur durch chemische Einwirkung weiter zerlegt werden, wobei man Atome erhält.

Atome sind in der Regel allein nicht beständig, sondern versuchen, sich miteinander zu Molekülen zu verbinden. Durch Zusammentritt zweier gleicher Atome entstehen die Moleküle der chemischen Elemente.

So verbinden sich zwei Wasserstoffatome zu einem Molekül Wasserstoff. Bei der Vereinigung verschiedener Atome entstehen dagegen die Moleküle der chemischen Verbindungen. (Durch Verbindung von zwei Atomen Wasserstoff und einem Atom Sauerstoff entsteht somit ein Molekül Wasser).

Die chemischen Elemente oder Grundstoffe werden durch Symbole gekennzeichnet, die aus einem oder zwei Buchstaben bestehen.

Zwei Atome Sauerstoff (Symbol O) treten zu einem Molekül Sauerstoff zusammen. Dies wird in der Chemie durch folgende Formel symbolisiert:



Das Sauerstoffmolekül besteht also aus zwei Atomen Sauerstoff. Verbindungen, die aus mehreren Atomen verschiedener Elemente bestehen, werden mit Hilfe der Elementsymbole so dargestellt, dass aus der chemischen Formel die Zusammensetzung, d.h. die Anzahl und Art der Atome, die die Verbindung aufbauen, hervorgeht.

Die Formel H_2O bedeutet also, dass ein Molekül Wasser aus 2 Atomen Wasserstoff (H) und einem Atom Sauerstoff (O) besteht. Die Anzahl gleichartiger Atome wird durch eine kleine tiefgestellte Zahl (Index) hinter dem Elementsymbol dargestellt.

Beispiel:

Ein Molekül Phosphorsäure, chemische Formel (H_3PO_4), besteht aus 3 Atomen Wasserstoff, 1 Atom Phosphor und 4 Atomen Sauerstoff.

Werden 2 oder mehrere Atome in Klammern gesetzt, so kommt dadurch zum Ausdruck, dass diese Atome zu einer Atomgruppe vereinigt sind. Ein Index hinter der Klammer zeigt an, dass diese Atomgruppe mehrmals im Molekül vorhanden ist.

Beispiel:

1 Molekül Bariumnitrat $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ besteht aus 1 Ba-Teilchen und 2 Nitrat-Gruppen. Jede der NO_3 -Gruppen besteht aus 1 Atom N und 3 Atomen O. Das Gesamtmolekül ist also aus 1 Atom Ba, 2 Atomen N und $2 \times 3 = 6$ Atomen O zusammengesetzt.

Eine Zahl, die vor einer Formel steht (Koeffizient), multipliziert das gesamte Molekül.

Beispiel:

$3 \text{H}_2\text{O} = 3$ Moleküle Wasser (H_2O), das sind insgesamt 6 Atome H und 3 Atome O.

2.2 Relative Atom- und Molekülmassen

Atome eines Elements sind gleichartig, Atome verschiedener Elemente haben verschiedene Größe und verschiedene Masse. Da die absolute Masse eines Atoms unvorstellbar klein ist (ca. 10^{-27} kg), verwendet man der Einfachheit halber Verhältniszahlen, die auf Kohlenstoff (Masse = 12 g) bezogen werden. Man nennt sie die relativen Atommassen A_r , die man bei Bedarf Tabellenwerken oder dem Periodensystem (PS) entnimmt (siehe Anhang!).

Z. B.:	H	1,01
	N	14,01
	O	16,00
	C	12,01

usw.

Die relative Molekülmasse M_r ist die Summe der relativen Atommassen der im Molekül enthaltenen Atome.

Daraus erhält man die Molekülmasse bei der Bildung von Ammoniak $3\text{H} + \text{N} = \text{NH}_3$ wie folgt:

$3 \times 1,01$ Masseneinheiten H (= 3,03) und 14,01 Masseneinheiten N reagieren miteinander zu 17,04 Masseneinheiten NH_3 .

Die relative Gesamtmasse des Ammoniakmoleküls ergibt sich also aus der Summe der enthaltenen relativen Atommassen.

Manche Moleküle kristallisieren mit einem oder mehreren Molekülen Wasser, dieses ist im Kristall gebunden und wird dann in der Formel zusätzlich wie folgt angegeben:

$\text{CuSO}_4 \times 5 \text{H}_2\text{O}$ (manchmal auch $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{aq.}$).

2.3 Stöchiometrische Grundgesetze

Die Atome haben das Bestreben, sich untereinander zu verbinden. Dies geschieht stets in einem bestimmten, ganzzahligen Atomverhältnis.

Beispiel:

Stickstoff (N) und Wasserstoff (H) bilden Ammoniak (NH_3), indem 3 Atome H mit einem Atom N reagieren. Dieses Verhältnis ist stets 1:3.

2.4 Molare Masse

Um anzugeben wie viel Stoff in einer Stoffportion vorhanden ist, kann man u.a. die Größen Masse und Stoffmenge heranziehen.

Während man die Masse mit Hilfe von Waagen routinemäßig messen kann, ist das Bestimmen von Stoffmengen nicht so ohne weiteres möglich, denn hier werden die Teilchen der Stoffportion gezählt. Und man muss über 10^{23} Teilchen zählen, bis man merkbare Mengen auf der Hand hat, denn erst dann liegt man im Grammbereich der Stoffportion. Daher hat man die (etwas unhandliche, aber massenmäßig gut erfassbare) Anzahl von $6,022 \cdot 10^{23}$ Teilchen zu einem Mol, Formelzeichen mol zusammengefasst und als Einheit der Stoffmenge festgelegt. Danach hat

eine Stoffportion, deren Teilchenanzahl $6,022 \cdot 10^{23}$ beträgt die Stoffmenge, 1 mol.
Die Art der Teilchen muss allerdings genau spezifiziert werden.

Da stöchiometrische Berechnungen über die Stoffmenge sehr übersichtlich sind, muss man die beiden Größen Masse und Stoffmenge in einander umrechnen können (siehe 2.5). Als Umrechnungsfaktor dient die molare Masse, die als Masse durch Stoffmenge definiert ist: $M = m/n$.

Wird die Masse in Gramm und die Stoffmenge in Mol angegeben, so ist die Einheit der molaren Masse Gramm durch Mol $M = \text{g/mol}$.

Allgemein ist die molare Masse eines Stoffes gleich der Summe ihrer relativen Atommassen, der man die Einheit g/mol hinzufügt. Sie enthält immer die gleiche Anzahl von Teilchen, nämlich $N_A = 6,022 \times 10^{23} / \text{mol}$.

Beispiel:

Berechnung der molaren Masse von Chromoxid Cr_2O_3 .

1 Molekül besteht aus zwei Atomen Cr und 3 Atomen O.

$$M(\text{Cr}_2\text{O}_3) = [2 A_r(\text{Cr}) + 3 A_r(\text{O})] \text{ g/mol}$$

Relative Atommasse von Chrom $A_r(\text{Cr}) = 52,00$

folglich 2 Atome $2 \times 52,00 = 104,00$

relative Atommasse von Sauerstoff $A_r(\text{O}) = 16,00$

folglich 3 Atome $3 \times 16,00 = 48,00$

Summe: **152,00**

$$M(\text{Cr}_2\text{O}_3) = 152,00 \text{ g/mol}$$

Beispiel:

Welche Masse hat ein Mol Wasser?

2 H-Atome: $2 \times 1,01 = 2,02$, 1 O-Atom: 16,00; die Summe ist 18,02, daher hat ein Mol Wasser die Masse von 18,02 g.

Wie kommt man nun von der Teilchenanzahl, die in Reaktionsgleichungen angegeben ist, zur Stoffmenge? Ganz einfach, indem wir jedes Teilchen (gedanklich) mit dem Faktor $6,022 \cdot 10^{23}$ multiplizieren. Und schon steht die entsprechende Anzahl mol vor uns.

Im obigen Beispiel der Ammoniakbildung machen wir aus den drei Atomen H 3 mol H und aus einem Atom N 1 mol N und wir erhalten, dass sich 3 mol Wasserstoff (=3,03 g) und 1 mol Stickstoff (= 14,01 g) zu 1 mol Ammoniak = (17,04 g) verbinden.

Beispiel:

Bei der Bildung von Schwefeleisen (FeS) tritt ein Atom Eisen mit 1 Atom Schwefel zu 1 Molekül FeS zusammen; d.h. aber auch dass sich 1 mol Fe mit 1 mol S zu 1 mol FeS verbindet.



Demnach reagieren 55,85 g Eisen mit 32,07 g Schwefel zu 87,92 g.

(Die Werte für die Ausgangsstoffe entnimmt man einer Tabelle oder dem PS).

Berechnung der prozentualen Zusammensetzung einer Verbindung

Mit Hilfe dieser Beziehungen kann der Massenanteil w (in %) der in einer Verbindung enthaltenen Elemente ermittelt werden.

Beispiel:

Man berechne die Massenanteile w der in Bariumcarbonat BaCO_3 enthaltenen Elemente in %.

Ein Molekül BaCO_3 besteht aus 1 Atom Ba, 1 Atom C und 3 Atomen O.

1 Mol $\text{BaCO}_3 = 197,34$ g.

$$M(\text{Ba}) = 137,33 \text{ g/mol}$$

$$M(\text{C}) = 12,01 \text{ g/mol}$$

$$3 M(\text{O}) = 48,00 \text{ g/mol}$$

$$\text{Summe: } 197,34 \text{ g/mol}$$

$$\begin{array}{rcccc} 197,34 \text{ g BaCO}_3 \text{ enthalten} & 137,33 \text{ g Ba} & 12,01 \text{ g C} & 48,00 \text{ g O} \\ 100 \text{ g BaCO}_3 \text{ enthalten} & x \text{ g Ba} & y \text{ g C} & z \text{ g O} \end{array}$$

$$x = w(\text{Ba}) = (137,33 \times 100) / 197,34 = 69,59\%$$

$$y = w(\text{C}) = (12,01 \times 100) / 197,34 = 6,09\%$$

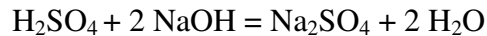
$$z = w(\text{O}) = (48,00 \times 100) / 197,34 = 24,32\%$$

Die Summe $x + y + z$ muss 100% ergeben! (w = Massenanteil; siehe unten)

2.4.1 Chemische Reaktionsgleichungen

Aufstellung einer chemischen Reaktionsgleichung

Die Umsetzung (Neutralisation) von Schwefelsäure mit Natronlauge kann durch folgende Reaktionsgleichung angegeben werden:



Da Elemente und Atome bei einer chemischen Reaktion nicht verschwinden oder erzeugt werden, ist die Anzahl und Art der Atome vor und nach der Reaktion gleich. Demnach muss die linke Hälfte der Gleichung die gleiche Anzahl Atome derselben Art enthalten wie die rechte.

Daher:

Linke Seite:

4 Atome H (2 Atome in H_2SO_4 und zwei Atome in 2 NaOH)
 1 Atom S (in H_2SO_4)
 6 Atome O (4 Atome in H_2SO_4 und zwei Atome in 2 NaOH)
 2 Atome Na (in 2 NaOH)

Rechte Seite:

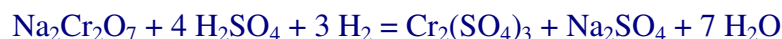
4 Atome H (in 2 H_2O)
 1 Atom S (in Na_2SO_4)
 6 Atome O (4 Atome in Na_2SO_4 und zwei Atome in 2 H_2O)
 2 Atome Na (in Na_2SO_4)

Man erkennt Übereinstimmung in beiden Gleichungshälften, die Gleichung ist also richtig!

2.5 Quantitäten bei chemischen Reaktionen

Die chemische Reaktionsgleichung hat doppelte Bedeutung, sie gibt nicht nur an, welche Reaktion abläuft, sondern sie gibt zugleich an, in welchen Stoffmengen die Stoffe dabei beteiligt sind. Da man Stoffmengen im Labor nicht messen kann, sind sie mit Hilfe der molaren Masse in die Masse umzurechnen.

Beispiel:



$$1 \text{ mol} + 4 \text{ mol} + 3 \text{ mol} = 1 \text{ mol} + 1 \text{ mol} + 7 \text{ mol}$$

$$262,00 \text{ g} + 392,36 \text{ g} + 6,06 \text{ g} = 392,21 \text{ g} + 142,07 \text{ g} + 126,14 \text{ g} \text{ (je ein Mol!)}$$

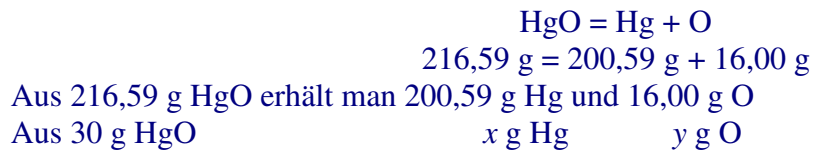
$$\text{Summe: } 660,42 \text{ g} = \text{Summe: } 660,42 \text{ g}$$

Findet die Reaktion genau in den nach der Reaktionsgleichung angegebenen Mengenverhältnissen statt, so nennt man sie stöchiometrisch.

Die theoretisch nötigen Massen der entstehenden Endprodukte, bzw. die anzuwendenden Massen der Ausgangsstoffe können durch einfache Schlussrechnung ermittelt werden.

Beispiel:

Wie viel Gramm Quecksilber (Hg) und Sauerstoff (O) erhält man durch Erhitzen von 30 g Quecksilberoxid (HgO), wenn die Reaktion nach der Gleichung $\text{HgO} = \text{Hg} + \text{O}$ stattfindet?



$$x = 30 \times 200,59 / 216,59 = 27,78 \text{ g Hg}$$

$$y = 30 \times 16,00 / 216,59 = 2,22 \text{ g O}$$

2.6 Lösungen

Eine Lösung besteht aus dem Lösungsmittel und dem darin gelösten Stoff. Die Angabe des Gehaltes (der Konzentration, des Massenanteils) einer Lösung kann verschieden erfolgen.

2.6.1 Massenanteil

Der Massenanteil, Formelzeichen w (kursives w), wird auf die enthaltene Masse des gelösten Stoffes in 100 Massenteilen Lösung (nicht Lösungsmittel!!) bezogen und kann in % (g/100 g Lösung) angegeben werden. In Arzneibüchern wird heute noch die veraltete Bezeichnung „Gewichtsprozent“ verwendet. Wenn keine besonderen Angaben beigefügt sind, handelt es sich stets um Lösungen mit Gewichtsprozenten.

Die oben in Worten gegebene Definition des Massenanteils kann auch in eine Größengleichung gefasst werden

$$w(\text{B}) = \frac{m(\text{B})}{m(\text{Lsg})}$$

Darin bedeutet B den jeweils gelösten Stoff, $m(\text{B})$ die Masse dieses Stoffes und $m(\text{Lsg})$ die Masse der Lösung

Eine 20%ige Lösung enthält demnach in 100 g Lösung 20 g des gelösten Stoffes. Zu ihrer Herstellung sind 80 g Lösungsmittel und 20 g des zu lösenden Stoffes nötig.

Beispiel:

a) Schlussrechnung

Es sollen 600 g einer 5%igen Kochsalzlösung hergestellt werden. Wie viel Gramm Kochsalz und Wasser werden benötigt?

100 g 5%ige Kochsalzlösung enthalten	5 g Kochsalz und	95 g Wasser
600 g 5%ige Kochsalzlösung enthalten	x g Kochsalz und	y g Wasser

$$x = (600 \times 5)/100 = 30 \text{ g Kochsalz.} \quad y = (600 \times 95)/100 = 570 \text{ g Wasser.}$$

(Die Summe der Massen beider Komponenten (Kochsalz und Wasser) muss die Gesamtmasse der Lösung ergeben. Deshalb genügt es, nur die Masse einer Komponente zu errechnen und die andere aus der Differenz zu bestimmen: $600 - 30 = 570$ g Wasser.)

b) Berechnung mit Hilfe der Größengleichung

Geg: $m(\text{Lsg}) = 600 \text{ g}$, $w(\text{NaCl}) = 5\% = 0,05$ (= 5 g/100 g)

Ges: $m(\text{NaCl})$

Umformen obiger Größengleichung in $m(\text{NaCl}) = w(\text{NaCl}) \cdot m(\text{Lsg})$ ergibt

$$m(\text{NaCl}) = 0,05 \cdot 600 \text{ g}$$

$$m(\text{NaCl}) = 30 \text{ g}$$

usw.

Beispiel:

Aus 45 g Kaliumchlorid ist eine 3%ige Lösung herzustellen. Wie viel Gramm dieser Lösung werden erhalten?

In einer 3%igen Lösung sind

3 g KCl	in	100 g Lösung enthalten
45 g KCl sind daher	in	x g Lösung

$$x = (45 \times 100)/3 = 1500 \text{ g Lösung}$$

Beispiel:

Wenn das Kaliumchlorid nur eine Reinheit von 95% besitzt, wie viel muss man für die Herstellung von 1500 g einer 3%igen Lösung nehmen? Siehe obige Rechnung für 100%ig reines KCl. Wenn das KCl nur 95% ist, wird entsprechend mehr gebraucht:

$$(45 \times 100)/95 = 47,37 \text{ g}$$

2.6.2 *Volumenkonzentration (Volumenprozent)*

Die veraltete Bezeichnung „Volumenprozent“ wird noch in Arzneibüchern verwendet. Sie gibt an, wie viele Volumenteile des reinen Stoffes in 100 Volumenteilen der Lösung (nicht des Lösungsmittels!!) enthalten sind. Die Angabe wird in der Hauptsache für Lösungen von Alkohol verwendet. Im Gegensatz zur Masse sind Volumina verschiedener Flüssigkeiten beim Mischen meist nicht additiv. (ein Liter Wasser und ein Liter Alkohol ergeben nicht 2 Liter Gemisch!).

Beispiel:

Wie viel Volumenprozent Alkohol enthält ein Alkohol-Wasser-Gemisch, das in 750 ml Gemisch 200 ml Alkohol enthält?

Antwort: 26,67 vol.-%

200 ml in 750 ml,

x in 100 ml: daher $x = (200 \times 100)/750 = 26,67 \text{ vol.-%}$

Auch für die Volumenkonzentration ist eine Größengleichung festgelegt: Die Volumenkonzentration σ (griech. sigma) ist der Quotient aus dem Volumen des reinen Stoffes B und dem Volumen der Lösung $\sigma = V(B)/V(\text{Lsg})$.

Wichtig!! Bei Rechnungen darf man Volumenprozent (vol.-%) und Gewichtsprozent (%) keinesfalls mischen, man muss immer nur die gleiche Einheit verwenden!!

2.6.3 *Angabe der Masse, die in einem bestimmten Volumen enthalten ist (Massenkonzentration)*

Dies sind Angaben wie 1 g HCl im Liter (d.h. in 1 Liter der fertigen Lösung ist 1 g HCl enthalten). Um dies in Gewichtsprozent umzurechnen, braucht man die Dichte der Lösung, damit man die Masse von 1 L Lösung berechnen kann.

Beispiel:

Wie viel Gramm chemisch reine Schwefelsäure sind in einem Liter einer 31,4 %igen Schwefelsäure enthalten? Ein Liter dieser Säure wiegt 1.230 kg.

100 kg dieser Säure haben ein Volumen von $100/1.230 = 81,3$ Liter.

100 kg = 81,3 l enthalten 31,4 kg H₂SO₄

Folglich ist in 1 Liter $31,4/81,3 = 0,386$ kg H₂SO₄ enthalten.

2.7 Verdünnen und Mischen von Lösungen

Beim Verdünnen oder Konzentrieren einer Lösung bleibt die Menge des in ihr gelösten reinen (100%igen) Stoffes konstant.

Beispiel

300 g einer 40%igen Lösung sollen so verdünnt werden, dass eine 20%ige Lösung entsteht.

Da die Lösung schwächer (20%ig) werden soll, muss Wasser zugegeben werden, wodurch die Menge der Lösung größer wird.

In 100 g der Lösung sind 40 g reiner Stoff enthalten

in 300 g daher x g

$x = (300 \times 40)/100 = 120$ g reine Substanz.

Diese 120 g sind auch nach dem Verdünnen der Lösung auf 20% vorhanden.

In 100 g 20%iger Lösung sind 20 g reine Substanz enthalten

Daher in x g 20%iger Lösung sind 120 g reine Substanz enthalten.

$x = (120 \times 100)/20 = 600$ g Lösung.

Mischen von Lösungen Mischungsregel

Problem: eine Lösung von 78% soll mit einer Lösung von 48% so gemischt werden, dass eine Lösung von 66% entsteht.

In 100 g 78%iger Lösung sind 78 g reiner 100%iger Stoff. Das sind für 100 g einer 66%igen Lösung die 66 g enthalten soll $(78 - 66) = 12$ g zuviel.

In 100 g 48%iger Lösung sind 48 g 100%iger Stoff, gegenüber der gewünschten Lösung also um $(66 - 48) = 18$ g zuwenig. Diese 18 g müssen mit Hilfe der konzentrierteren Lösung zugefügt werden. 18 g sind in wie viel Gramm der 78%igen Lösung enthalten?

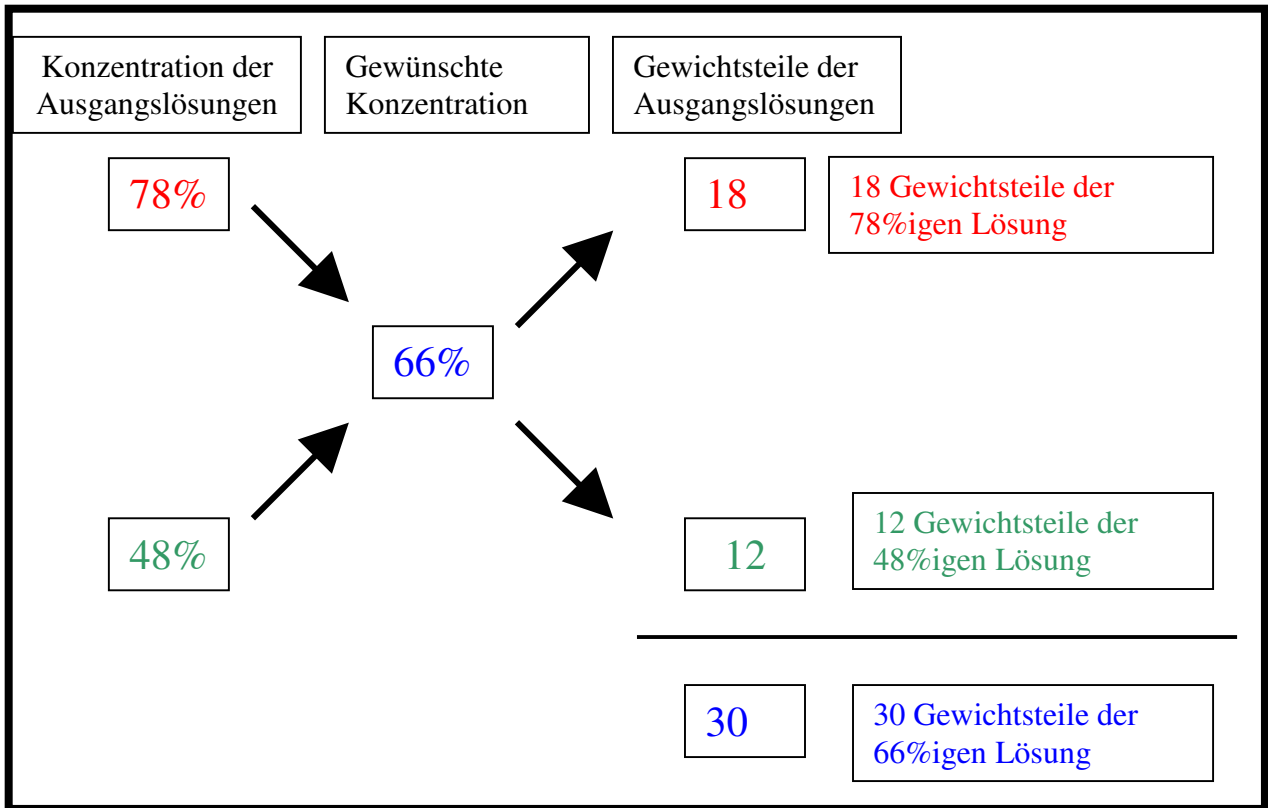
100g 78%ige Lösung enthalten 12 g Überschuss

x g enthalten 18 g Überschuss. $x = (18 \times 100)/12 = 150$ g.

Es müssen zu 100 g der 48%igen Lösung 150 g der 78%igen Lösung zugesetzt werden; oder anders ausgedrückt zu einem Gewichtsteil der 48%igen Lösung müssen 1,5 Gewichtsteile der 78%igen Lösung zugesetzt werden, dann erhält man 2,5 Gewichtsteile der gewünschten 66%igen Lösung.

Zur raschen Errechnung dieses Verhältnisses dient die so genannte Mischungsregel:

Man schreibt die Konzentrationen der Ausgangslösungen untereinander:

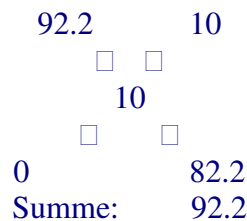


Anschließend deutet man durch Pfeile auf die Konzentration der gewünschten Lösung (66%). Dann bildet man in Richtung der Pfeile die Differenzen und erhält die zugehörigen Gewichtsteile. Das Verhältnis der anzuwendenden Mengen der Ausgangslösungen ergibt sich aus dem Pfeilkreuz zu 18:12. (18 Gewichtsteile 78%ige Lösung und 12 Gewichtsteile 48%iger Lösung ergeben 30 Gewichtsteile 66%ige Lösung.

(Die jeweils zusammengehörigen % und Gewichtsteile stehen im Pfeilkreuz in einer Linie. Beim Verdünnen mit Wasser setzt man für dieses die Konzentration 0% ein. Das Mischungskreuz kann auch beim Konzentrieren einer Lösung durch Wasserentzug verwendet werden.)

Beispiel:

Es sollen 5,33 kg einer 10%igen Schwefelsäure durch Verdünnen einer 92,2%igen Säure mit Wasser hergestellt werden. Das Mischungskreuz ist wie folgt:



Zur Herstellung von 92,2 g 10%iger werden demnach 10 g 92,2%iger Schwefelsäure und 82,2 g Wasser benötigt. Durch einfache Schlussrechnung folgt:

Für 92,2 g (10%iger Säure) benötigt man 10 g (92,2%ige Säure)

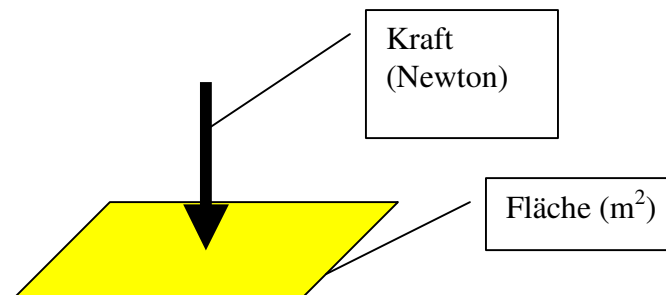
für 5330 gx g (92,2%ige Säure)

$x = (5330 \times 10) / 92,2 = 587,1$ g Schwefelsäure (92,2%ig). Die Wassermenge errechnet sich ebenfalls durch analoge Rechnung aus dem Mischungskreuz oder aus der Differenz zur Endmenge: $5330 \text{ g} - 587,1 \text{ g} = 4742,9 \text{ g}$ Wasser.

3 Gasvolumina

3.1 Druck und Kraft

Der Druck p ist die senkrecht auf eine Fläche A wirkende Kraft F : $p = F/A$.



Die Einheit des Druckes ist 1 Pascal (Pa); $1 \text{ Pa} = 1 \text{ N} / \text{m}^2$. Dies ist eine sehr kleine Einheit, daher hat man für $100\,000 \text{ Pa} (= 10^5 \text{ Pa})$ die Einheit Bar eingeführt.

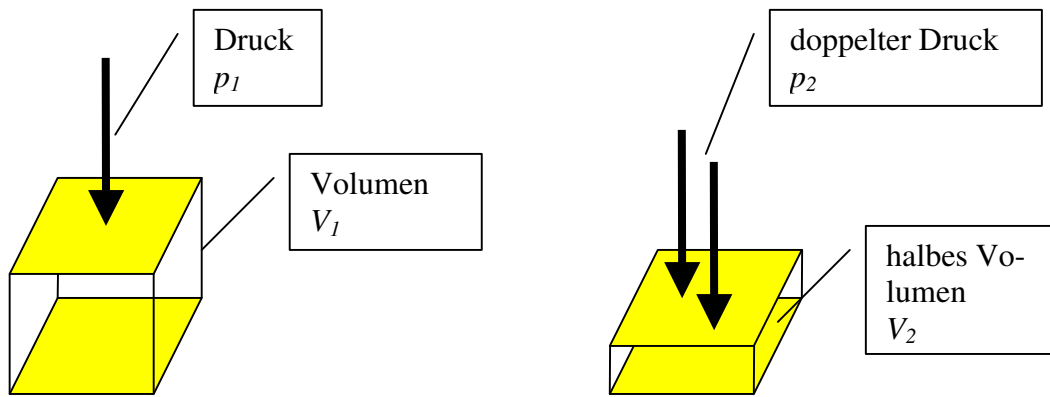
Somit gilt: $1 \text{ bar} = 1000 \text{ mbar (Millibar)} = 10^5 \text{ Pa}$

Frühere Einheiten: $1 \text{ atm} = 760 \text{ Torr} = 101325 \text{ Pa} = 1,01325 \text{ bar}$.

3.2 Gasgesetze

Zusammenhang zwischen Volumen und Druck bei konstanter Temperatur

Jedes in einem Gefäß eingeschlossene Gas steht unter einem bestimmten Druck und nimmt dabei ein festgelegtes Volumen ein. Druck und Volumen eines Gases sind voneinander abhängig. Bei konstanter Temperatur (isothermer Zustand) gilt: je höher der Druck umso kleiner wird das Volumen eines Gases; das heißt Druck und Volumen sind umgekehrt proportional.



Daher gilt die Beziehung:

$$p_1:p_2 = V_2:V_1$$

Diese Gleichung sagt aus, dass der Druck im Zustand 1 zum Druck im Zustand 2 sich so verhält wie das Volumen im Zustand 2 zum Volumen im Zustand 1.

Daraus ergibt sich, dass das Produkt aus Volumen und Druck bei gleich bleibender Temperatur stets konstant ist:

$$p_1 \times V_1 = p_2 \times V_2 = p_3 \times V_3 = \dots$$

oder allgemein:

$$p \times V = \text{const.}$$

Beispiel:

Welches Volumen nehmen 32 cm^3 Stickstoffgas, gemessen bei 980 mbar , bei einem Druck von 1013 mbar ein?

Antwort: 30.96 cm^3

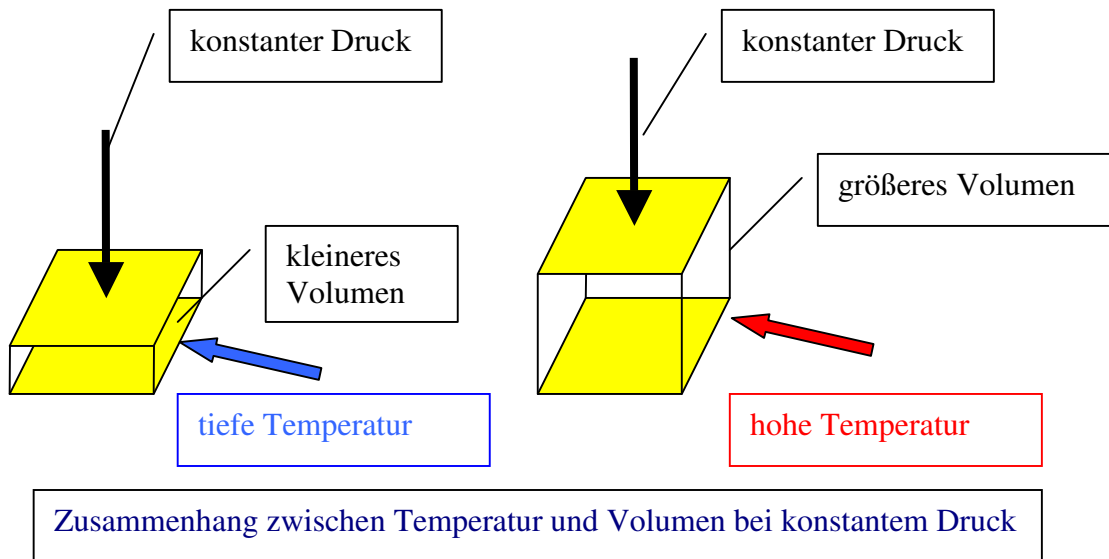
$$V_2 = (p_1 \times V_1) / p_2 = (980 \text{ mbar} \times 32 \text{ cm}^3) / 1013 \text{ mbar} = 30,96 \text{ cm}^3$$

Einfluss der Temperatur.

Wird einem Gas Wärme zugeführt, ohne dass sich der Druck ändert (isobarer Zustand), so erhöht sich seine Temperatur und das Volumen vergrößert sich. Bei allen Berechnungen ist die Temperatur in Kelvin einzusetzen. Werte aus anderen Skalen sind umzurechnen.

Zusammenhang zwischen Kelvin und Grad Celsius:

273 K sind $0 \text{ }^\circ\text{C}$. Die Gradeinteilung ist gleich. $20 \text{ }^\circ\text{C}$ sind daher $273 + 20 = 293 \text{ K}$; $-30 \text{ }^\circ\text{C}$ sind $273 - 30 = 243 \text{ K}$, bzw. 300 K sind $300 - 273 = 27 \text{ }^\circ\text{C}$.



Die Volumenzunahme pro Kelvin ist für alle Gase gleich. Bei Anstieg der Temperatur um 1 K dehnt sich das Gas um den $1/273$ ten Teil ($= 0,00367 \text{ K}^{-1}$) des Gasvolumens bei 0° C aus. Es gilt somit ein ähnliches Gesetz wie zuvor:

$$V_1/T_1 = V_2/T_2 = V_3/T_3 = \text{const.}$$

oder allgemein:

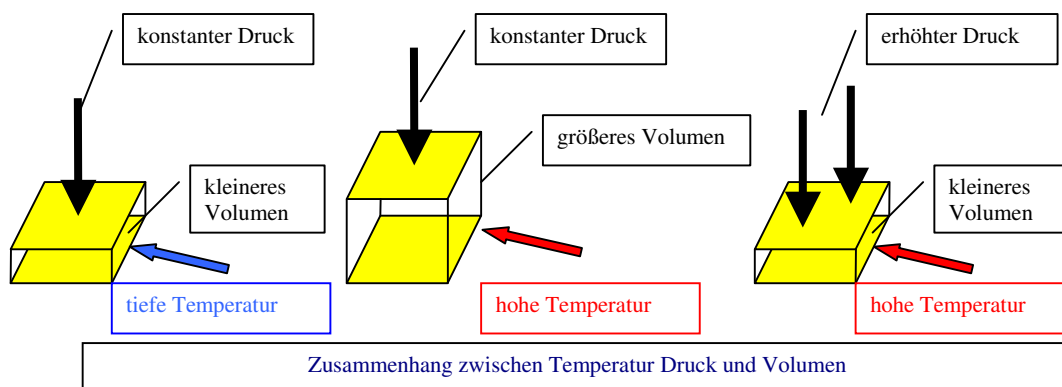
$$V/T = \text{const.}$$

Beispiel:

Welches Volumen nehmen 2 Liter Sauerstoff gemessen bei 15° C ein, wenn das Gas bei unverändertem Druck auf -12° C abgekühlt wird?

Antwort: 1,813 Liter.

$$V_2 = (V_1 \times T_2)/T_1 = (2 \text{ l} \times 261 \text{ K})/288 \text{ K} = 1,813 \text{ L}$$



Wird ein Gas bei 0°C in einem abgeschlossenem Volumen, das unter dem Druck p_0 steht, um 1 K erwärmt, dehnt es sich um den (1/273)ten Teil seines Volumens aus. Um es wieder auf das ursprüngliche Volumen V_0 zusammenzudrücken, muss der Druck um (1/273)tel seines ursprünglichen Wertes erhöht werden. Das bedeutet, dass bei konstantem Volumen (isochorer Zustand) der Druck um diesen Betrag ansteigt.

Daraus folgt:

$$(p_0 \times V_0)/T_0 = (p_1 \times V_1)/T_1 = (p_2 \times V_2)/T_2 = \text{const.}$$

oder allgemein:

$$(p \times V)/T = \text{const.}$$

Beispiel:

Welcher Druck ist erforderlich, um 5 L Wasserstoff, gemessen bei 10 °C und 986,6 mbar, bei 25 °C auf 1/5 seines Volumens zusammenzupressen?

Antwort: 5194,5 mbar

$$p_2 = (p_1 \times V_1 \times T_2)/T_1 \times V_2 = (986,6 \text{ mbar} \times 5 \text{ L} \times 298 \text{ K})/ 1 \text{ L} \times 283 \text{ K} = 5194,5 \text{ mbar}$$

3.3 Molares Volumen

Gleiche Gasvolumina enthalten bei gleichem Druck und gleicher Temperatur die gleiche Anzahl von Molekülen, unabhängig von der Art des Gases. Das molare Volumen ist das stoffmengenbezogene Volumen eines Gases mit der Einheit Liter/mol. Wie groß ist das Volumen von 1 mol eines Gases?

Bei 0 °C und Normdruck (1013,25 mbar) sind das 22,414 L/mol (Normzustand!).

Bei realen Gasen sind leichte Abweichungen möglich. Mit Hilfe des molaren Volumens kann ein Gasvolumen in Masse umgerechnet werden und umgekehrt.

Beispiel:

Welches Volumen hat 1 g Wasserstoff im Normzustand?

Antwort: 11,09 Liter.

22,41 L sind 1 mol $H_2 = 2,02 \text{ g}$

1 g besitzt das Volumen $(22,41 \text{ l} \times 1 \text{ g})/ 2,02 \text{ g} = 11,09 \text{ L}$.

Wie groß ist das Volumen bei 1003 mbar und 25 °C?

Antwort: 12,23 L

$$(p_1 \times V_1)/T_1 = (p_2 \times V_2)/T_2 \Rightarrow V_2 = (p_1 \times V_1 \times T_2)/(T_1 \times p_2) = (1013,25 \text{ mbar} \times 11,09 \text{ l} \times 298 \text{ K})/(273 \text{ K} \times 1003 \text{ mbar}) = 12,23 \text{ L}$$

3.4 Genauigkeit beim Zahlenrechnen

Maßgebend für die Angabe von Mess- und Analysenresultaten sind die Mittel, welche zur Ausführung der Messung gedient haben. Es wäre wenig sinnvoll in einem pharmazeutischen Betrieb den Inhalt eines 8000 Liter fassenden Tanks auf Milliliter genau anzugeben. Ebenso falsch wäre es, bei der Wägung auf einer analytischen Waage die Milligramm zu vernachlässigen. Zahlenwerte sollten stets mit so vielen Stellen angegeben werden, dass die vorletzte Stelle noch sicher, die letzte schon als unsicher gilt. Das Messergebnis richtet sich also nach der Messgenauigkeit und dem praktischen Bedürfnis.

Beispiel:

Angabe des Wassergehalts einer Tablette: 0,53% und nicht 0,534278%.

3.5 Literatur

Horst Kuchling: Taschenbuch der Physik 18. Auflage Fachbuchverlag Leipzig (2004)

Heribert Huber: Größen Relationen Reaktionen (Rechnen in der Chemie und Pharmazie) ÖH Skriptum 8. Auflage 2005.

Walter Wittenberger: Rechnen in der Chemie Grundoperationen Stöchiometrie 14. Auflage Springer Verlag Wien New York 1995.

Dank

Herrn Dr. Heribert Huber sei für die Durchsicht und Korrektur des Manuskripts herzlich gedankt.

3.6 *Atommassen*

Die wichtigsten relativen Atommassen:

Ag	Silber.....	107,87	K	Kalium.....	39,10
Al	Aluminium.....	26,98	Mg	Magnesium.....	24,31
As	Arsen.....	74,92	Mn	Mangan.....	54,94
Au	Gold.....	196,97	Mo	Molybdän.....	95,94
B	Bor.....	10,81	N	Stickstoff.....	14,01
Ba	Barium.....	137,33	Na	Natrium.....	23,00
Bi	Wismut.....	208,98	Ni	Nickel.....	58,69
Br	Brom.....	79,90	O	Sauerstoff.....	16,00
C	Kohlenstoff.....	12,01	P	Phosphor.....	30,97
Ca	Calcium.....	40,08	Pb	Blei.....	207,20
Cd	Cadmium.....	112,41	Pt	Platin.....	195,08
Cl	Chlor.....	35,45	S	Schwefel.....	32,07
Co	Kobalt.....	58,93	Sb	Antimon.....	121,76
Cr	Chrom.....	52,00	Si	Silicium.....	28,09
Cu	Kupfer.....	63,55	Sn	Zinn.....	118,71
F	Fluor.....	19,00	Sr	Strontium.....	87,62
Fe	Eisen.....	55,85	Ti	Titan.....	47,88
H	Wasserstoff.....	1,01	U	Uran.....	238,03
Hg	Quecksilber.....	200,59	Zn	Zink.....	65,39
J	Jod.....	126,90			

3.7 *Präfixe für sehr große und sehr kleine Zahlenwerte*

Vielfaches	Präfix	Symbol	Teil	Präfix	Symbol
10	Deka	da	10^{-1}	Dezi	d
10^2	Hekto	h	10^{-2}	Zenti	c
10^3	Kilo	k	10^{-3}	Milli	m
10^6	Mega	M	10^{-6}	Mikro	μ
10^9	Giga	G	10^{-9}	Nano	n
10^{12}	Tera	T	10^{-12}	Piko	p
10^{15}	Peta	P	10^{-15}	Femto	f
10^{18}	Exa	E	10^{-18}	Atto	a