

Suche nach Ruhe, aber durch das Gleichgewicht, nicht durch den Stillstand deiner Tätigkeiten.

Friedrich Schiller – Der Schlüssel zur Gelassenheit

1.1 Erläutern Sie, in wie weit ein chemischer Gleichgewichtszustand sich im Stillstand befindet.

1.2 Eine Carbonsäure und ein Alkanol wurden so zusammengegeben, dass die Anfangskonzentration jeweils 3 mol/l betragen. Wie groß sind die Gleichgewichtskonzentrationen aller beteiligter Reaktionspartnern, wenn bei bestimmten Reaktionsbedingungen $K_c = 4,5$ beträgt?

1.3 Bei der Ammoniaksynthese aus den Elementen beträgt die Gleichgewichtskonstante bei bestimmten Reaktionsbedingungen ($\vartheta = 243 \text{ °C}$) $K_C = 100 \text{ L}^2/\text{mol}^2$. Die Anfangskonzentration im Reaktionsgefäß betragen: $c(\text{H}_2) = 2 \text{ mol/L}$, $c(\text{N}_2) = 1,5 \text{ mol/L}$.

- Formulieren Sie das MWG mit den GG-Konzentrationen (nur Gleichung aufstellen mit x-Termen)
- Die rechnerischen Lösungen der Gleichung aus a) betragen $x_1 = 0,5846$ und $x_2 = 1,5057$. Berechnen Sie die GG-Konzentrationen aller beteiligten Stoffe.
- Berechnen Sie die Partialdrücke aller Stoffe, wenn bei den gegebenen Bedingungen der Gesamtdruck 10 MPa beträgt. Gehen Sie von idealem Gasverhalten aller Stoffe aus.
- Berechnen Sie die Gleichgewichtskonstante K_p .
- Wie wirkt sich eine Erhöhung des Drucks auf das chemische Gleichgewicht aus?

1.4 Distickstofftetraoxid (N_2O_4) steht mit NO_2 im Gleichgewicht.

- Die Gleichgewichtskonstante K_p beträgt bei 45 °C $K_p = 600 \text{ hPa}$. Berechnen Sie die Gleichgewichtspartialdrücke der einzelnen Komponenten, wenn der Gesamtdruck im GG 1000 hPa beträgt.
- Berechnen Sie K_C bei der entsprechenden Temperatur.

1.5 Aus Kohlenstoffmonoxid und Chlor kann sich in einer GG-Reaktion Phosgen (COCl_2) bilden. In einen Versuchsreaktor wurden die Drücke $p(\text{CO}) = 666 \text{ hPa}$ und $p(\text{Cl}_2) = 533 \text{ hPa}$ vorgelegt. Nach GG-Einstellung beträgt der Gesamtdruck $p_{\text{gesamt}} = 800 \text{ hPa}$.

- Berechnen Sie die Partialdrucke der Reaktionsteilnehmer im GG-Zustand.
- Welcher Druck wäre bei vollständigem Stoffumsatz zu erwarten gewesen?
- Berechnen Sie K_p in Pa^{-1} .

1.6 Für das Gleichgewicht $\text{Fe}^{2+} + \text{Ag}^+ \rightleftharpoons \text{Fe}^{3+} + \text{Ag (s)}$ wurden in Lösung folgende GG-Konzentrationen vorgefunden. $c(\text{Fe}^{2+}) = 0,04 \text{ mol/L}$, $c(\text{Fe}^{3+}) = 0,06 \text{ mol/L}$, $c(\text{Ag}^+) = 0,08 \text{ mol/L}$.

- Berechnen Sie K_c .
- Wie groß waren die Anfangskonzentrationen der übrigen Edukte und Produkte, wenn zu Beginn $c_0(\text{Fe}^{3+}) = 0,1 \text{ mol/L}$ vorlagen?

1.7 Zu Beginn der Synthese von Iodwasserstoff aus den Elementen lagen die Konzentration $c(\text{H}_2) = 11,2 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$ $c(\text{I}_2) = 10,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$ vor. Im Zustand des chemischen Gleichgewichts wurden $c(\text{I}_2) = 1,8 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$ gemessen. Formulieren Sie die Reaktionsgleichung und berechnen Sie die Gleichgewichtskonstante K_c .

1.8 Für die Reaktion von Stickstoff und Sauerstoff zu Stickstoffmonooxid gilt bei einer bestimmten sehr hohen Temperatur die Gleichgewichtskonstante $K_c = 3 \cdot 10^{-3}$. Berechnen Sie die Gleichgewichtskonzentrationen aller beteiligten Stoffe, wenn zu Beginn der Reaktion in einem 2 L-Reaktionsgefäß 1 mol Stickstoff und 1,5 mol Sauerstoff eingeleitet werden.

1.9 Ethansäure (CH₃-COOH) reagiert in einer Gleichgewichtsreaktion mit Ethanol (HO-CH₂-CH₃) zu Ethansäureethylester (CH₃-CO-O-CH₂-CH₃) und Wasser:



- Mischt man 1,00 mol Ethansäure und 1,00 mol Ethanol in einem geschlossenen Gefäß so erhält man nach Reaktionsbeginn und Einstellung des Gleichgewichts 0,667 mol des Esters. Berechnen Sie die restlichen Gleichgewichtskonzentrationen und die Gleichgewichtskonstante K_c , wenn das Lösungsvolumen konstant 1 L beträgt.
- Auch als Denkaufgabe ohne rechnen lösbar: Welche Stoffmenge des Esters läge im GG vor, wenn man zu Beginn jeweils 1 mol der Produkte (H₂O und Ester) vorgelegt hätte? Incl. kleine Begründung .
- Berechnen Sie mithilfe von K_c aus Teilaufgabe a) die Konzentration der Reaktionsteilnehmer im Gleichgewicht wenn 0,2 mol Ethanol, 0,03 mol Ethansäure, 0,05 mol H₂O und 1 mol Ester gemischt werden ($V = 0,15 \text{ L}$).

1.10 Nitrosylchlorid (NOCl) zerfällt bei höheren Temperaturen in einer GG-Reaktion zu Chlor und NO. Die Gleichgewichtskonstante beträgt dabei $K_c = 4,4 \cdot 10^{-4} \text{ mol/L}$. In einem Reaktionsgefäß mit 1 L werden 2 mol NOCl eingefüllt und bis zur GG-Einstellung auf 500 °C erhitzt.

- Formulieren Sie die Reaktionsgleichung.
- Formulieren Sie das Massenwirkungsgesetz für das Gleichgewicht.
- Mit Hilfe eines Computeralgebrasystem oder eines grafikfähigen Taschenrechners: Lösen Sie die Gleichung nach x auf und geben Sie die GG-Konzentrationen aller beteiligten Stoffe an. [*Hinweis zum Weiterrechnen ohne Computeralgebra o.ä.: einzige reelle Lösung der Gleichung: $x_1 = 0,0598$*]

1.11 Phosphorpentachlorid zersetzt sich zu Phosphortrichlorid und Chlor, wobei die Gleichgewichtskonstante $K_c = 0,90 \text{ mol/L}$ beträgt.

- Formulieren Sie die Reaktionsgleichung.
- Berechnen Sie die Masse an Chlor im chemischen Gleichgewicht, wenn zu Beginn im 1L-Autoklav 0,04 mol PCl₅, 0,01 mol PCl₃ und 0,00 mol Cl₂ vorgelegt wurden.

1.12 Wikipedia gibt den Volumenanteil an CO im Boudouard-Gleichgewicht bei 700 °C mit 58% an. Berechnen Sie K_p und K_c des Boudouard-Gleichgewichts und vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem auf S. 167 des Lehrbuchs angegebenen Wert. Hinweis: Boudouard-GG: CO₂ und C stehen mit CO im Gleichgewicht.

2. Aufgaben zum Prinzip des kleinsten Zwangs

2.1 Bei bestimmten Umgebungsbedingungen besitzt die Bildungsreaktion von Iodwasserstoff aus den Elementen $K_c = 5,0$.

- Berechnen Sie die Gleichgewichtskonzentrationen, wenn 1 mol der beiden Ausgangsstoffe im 1 L-Autoklaven zur Reaktion gebracht werden.
- Wie ändern sich die Gleichgewichtskonzentrationen wenn man die anfängliche Wasserstoffkonzentration auf 2 mol erhöht, und die Iodkonzentration bei 1 mol/L belässt ?

2.2 Wie verändert sich die Lage des chemischen Gleichgewichts der folgenden Reaktionen? Geben sie auch die passende Reaktionsgleichung an, wobei von Molekülverbindungen die Strukturformeln anzugeben sind.

A) Erhöhen der Temperatur B) Erniedrigen des Drucks

- Schwefeldioxid + Sauerstoff \rightleftharpoons Schwefeltrioxid (g), $\Delta H = - 197 \text{ kJ}$
- Calciumhydroxid \rightleftharpoons Calciumoxid + Wasser (g), $\Delta H = 109 \text{ kJ}$

c) Hydrierung von Kohlenstoffmonoxid zu Methanol (g), $\Delta H = -92 \text{ kJ}$

d) Wassergasgleichgewicht: $\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$, $\Delta H = 41 \text{ kJ}$

2.3 Durch welche Maßnahmen können Gase verflüssigt werden? Begründen Sie mithilfe einer chemischen Gleichgewichtsreaktion am Beispiel vom Sauerstoff.

2.4 Das Haber-Bosch-Verfahren ist das wichtigste Verfahren zur Herstellung von Ammoniak aus den Elementen.

a) Die Gleichgewichtsausbeute an Ammoniak lässt sich bei der Haber-Bosch-Synthese durch Erhöhung des Drucks und Senkung der Temperatur steigern? Begründen Sie!

b) Weshalb sinkt bei Anwendung dieser beiden Maßnahmen die Stundenausbeute an Ammoniak, wenn nicht weitere Vorkehrungen getroffen werden? Welche Vorkehrungen sind das?

3. Weitere Aufgaben (z.T. aus Klassenarbeiten) – einige Teilaufgaben aus angrenzenden Themenfeldern

3.1 Bei sehr hohen Temperaturen zerfällt gasförmiges Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff. Bei 2257 °C und $1,000 \text{ bar}$ Gesamtdruck sind $1,77 \%$ der vorgelegten Wassermoleküle in molekularen Wasserstoff und molekularen Sauerstoff zerfallen.

- Notieren Sie die Reaktionsgleichung und berechnen Sie die Gleichgewichtspartialdrücke der beteiligten Stoffe auf 3 Nachkommastellen genau.
- Berechnen Sie die Gleichgewichtskonstanten K_p und K_c .
- Wie verändern sich die einzelnen Stoffmengenanteile wenn man den Gesamtdruck erhöht? Begründen Sie mit dem Prinzip des kleinsten Zwangs.
- Es soll der Partialdruck von H_2O berechnet werden, wenn man den Gesamtdruck auf 2 bar erhöht. Formulieren Sie die mathematische Modellierung mit „x“ (Massenwirkungsgesetz). Die eigentliche Berechnung ist dann nicht nötig. Hinweis: Wenn Sie K_p in Aufgabe b) nicht berechnen konnten, dann gehen Sie von $K_p \approx 10^{-5} \text{ bar}^{-1}$ aus.

3.2. Eisen(III)-Ionen bilden mit Chlorid-Ionen in exothermer Reaktion den Komplex Tetrachloridoferrat(III) $[\text{FeCl}_4]^-$.

- Formulieren Sie die Reaktionsgleichung und erklären Sie ob diese Reaktion auch als Säure-Base-Reaktion aufgefasst werden kann. Ordnen Sie ggf. die Begriffe Säure und Base den Verbindungen zu.
- Berechnen Sie die Gleichgewichtskonstante K_c , wenn nach dem Mischen von $0,250 \text{ mol/L Fe}^{3+}$ und $0,500 \text{ mol/L Cl}^-$ und Einstellung des Gleichgewichts sich eine Konzentration von $0,215 \text{ mol/L}$ an freiem Fe^{3+} nachweisen lässt?
- Wie verändert sich die Gleichgewichtskonzentration an Eisen(III)-Ionen, wenn die Temperatur erhöht wird? Begründen Sie!
- Wie verändert sich die Gleichgewichtskonstante K_c wenn die Konzentration an Chlorid-Ionen erhöht wird? Begründen Sie!

Lösungen – ohne Gewähr

Nr. 1.1

Erläuterung des dynamischen GG-Zustands. Reaktion ist nicht zum Stillstand gekommen. Der Stoffumsatz der Hinreaktion entspricht im GG dem Stoffumsatz der Rückreaktion. Die Konzentrationen der Edukte und Produkte ändert sich deshalb nicht.

Nr. 1.2

	Säure	+	Alkohol	⇌	Ester	+	H ₂ O
zu Beginn [mol/L]	3		3		0		0
im GG [mol/L]	3-x		3-x		x		x

$$\text{MWG} \Rightarrow 4,5 = \frac{x \cdot x}{(3-x) \cdot (3-x)}$$

Umformung in die allgemeine Form: $3,5x^2 - 27x + 40,5 = 0$

Lösung des Gleichungssystem: $x_1 \approx 2,0389$ $x_2 \approx 5,6754$

Da die GG-Konzentrationen (3-x) nicht negativ sein können, kann nur x_1 chemisch interpretiert werden.

Für die GG-Konzentrationen gilt: **c(Säure) = c(Alkohol) = 3 - x_1 = 0,9611 mol/L, c(Ester) = c(H₂O) = x_1 = 2,0389 mol/L**

Nr. 1.3

	N ₂	+	3 H ₂	⇌	2 NH ₃
zu Beginn [mol/L]	1,5		2		0
im GG [mol/L]	1,5-x		2-3x		2x

$$\text{a) MWG} \Rightarrow 100 = \frac{(2x)^2}{(1,5-x) \cdot (2-3x)^3}$$

b) x_2 ist chemisch nicht interpretierbar, da die GG-Konzentration nicht unter Null sinken kann.

GG-Konz: $c(\text{N}_2) = 1,5 - x_1 = 0,9154 \text{ mol/L}$, $c(\text{H}_2) = 2 - 3x_1 = 0,2462 \text{ mol/L}$, $c(\text{NH}_3) = 2x_1 = 1,1692 \text{ mol/L}$

c) Die Summe der Partialdrücke beträgt 10 MPa. Die Partialdrücke der einzelnen Komponenten ergeben sich aus den Stoffmengenanteilen (bzw. Konzentrationsanteilen). *Beispiel:* Stellt ein Komponente z.B. 90% der Gesamtgaskonzentration, so entfallen auch 90% des Gesamtdrucks auf diese Komponente. Der Partialdruck dieser Komponente würde dann 90% des Gesamtdrucks entsprechen: $p(\text{Gas}) = 0,9 \cdot p_{\text{gesamt}}$

Die Gesamtkonzentration an Gas beträgt

$$c_{\text{gesamt}} = 0,9154 \frac{\text{mol}}{\text{L}} + 0,2462 \frac{\text{mol}}{\text{L}} + 1,1692 \frac{\text{mol}}{\text{L}} = 2,3308 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$\chi(N_2) = \frac{0,9154 \frac{\text{mol}}{\text{L}}}{2,3308 \frac{\text{mol}}{\text{L}}} = 0,39274 (\approx 39,274\%) \Rightarrow p(N_2) = 0,39274 \cdot 10 \text{ MPa} \approx 3,9274 \text{ MPa}$$

$$\chi(H_2) = \frac{0,2462 \frac{\text{mol}}{\text{L}}}{2,3308 \frac{\text{mol}}{\text{L}}} \approx 0,10563 (\approx 10,563\%) \Rightarrow p(H_2) = 0,10563 \cdot 10 \text{ MPa} \approx 1,0563 \text{ MPa}$$

$$\chi(NH_3) = \frac{1,1692 \frac{\text{mol}}{\text{L}}}{2,3308 \frac{\text{mol}}{\text{L}}} \approx 0,50163 (\approx 50,163\%) \Rightarrow p(NH_3) = 0,50163 \cdot 10 \text{ MPa} \approx 5,0163 \text{ MPa}$$

d) Mit Hilfe der Gleichgewichtspartialdrücke lässt sich K_p berechnen:

$$K_p = \frac{p^2(NH_3)}{p(N_2) \cdot p^3(H_2)} = \frac{(5,0163 \text{ MPa})^2}{(3,9274 \text{ MPa}) \cdot (1,0563 \text{ MPa})^3} \approx 5,436 \text{ MPa}^{-2}$$

Alternativ kann K_p auch direkt aus K_c berechnet werden:

$K_p = K_c \cdot (R \cdot T)^{\Delta n}$ wobei $\Delta n = \text{Summe der Eduktkoeffizienten} - \text{Summe der Produktkoeffizienten}$

$$K_p = 100 \frac{\text{L}^2}{\text{mol}^2} \cdot (0,08314 \frac{\text{L} \cdot \text{bar}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \cdot 516,15 \text{ K})^{-2} \approx 0,0543 \text{ bar}^{-2}$$

$$0,0543 \text{ bar}^{-2} = 0,0543 \frac{1}{\text{bar}^2} = 0,0543 \frac{1}{(0,1 \text{ MPa})^2} = 0,0543 \frac{1}{0,01 \cdot \text{MPa}^2} = 5,43 \text{ MPa}^{-2}$$

e) Nach dem Prinzip des kleinsten Zwangs verschiebt sich das GG auf die Seite, bei der weniger Gasteilchen vorliegen. Das GG verschiebt sich also nach rechts in Richtung NH_3 .

Nr. 1.4

Reaktionsgleichung: $N_2O_4 \rightleftharpoons 2 NO_2$

Im GG gelten folgende beiden Beziehungen:

$$\text{MWG} \Rightarrow K_p = \frac{p^2(NO_2)}{p(N_2O_4)} = 600 \text{ hPa} \quad \text{Summe der Partialdrücke: } p(NO_2) + p(N_2O_4) = 1000 \text{ hPa}$$

Es handelt sich um ein Gleichungssystem, dass über das Einsetzungsverfahren gelöst werden kann.

Im MWG kann man z.B. $p(N_2O_4)$ durch $1000 - p(NO_2)$ ersetzen.

$$600 = \frac{p^2(NO_2)}{1000 - p(NO_2)} \Rightarrow \text{Wenn man } p(NO_2) \text{ durch } x \text{ ersetzt, resultiert nach Umformung:}$$

$$x^2 + 600x - 600000 = 0$$

Die Lösungen dieser Gleichung lauten: $x_1 \approx -1130,66$ und $x_2 \approx 530,66$

Nur x_2 kann chemisch interpretiert werden, da Drücke nicht negativ werden können.

$$\Rightarrow p(\text{NO}_2) \approx 530,7 \text{ hPa.} \Rightarrow p(\text{N}_2\text{O}_4) = 1000 - 530,66 \text{ hPa} \approx 469,3 \text{ hPa}$$

b)

$$K_c = \frac{K_p}{(RT)^{\Delta n}} = \frac{60000 \text{ Pa}}{\left(8,314 \frac{\text{m}^3 \cdot \text{Pa}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \cdot 318,15 \text{ K}\right)^1} \approx 22,68 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \approx 0,02268 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

Nr. 1.5

a)	CO	+	Cl ₂	=	COCl ₂
zu Beginn [hPa]	666		533		0
im GG [hPa]	666-x		533-x		x

Da die Summe der Partialdrücke im GG zusammen 800 hPa beträgt, kann man schreiben:

$$(666 \text{ hPa} - x) + (533 \text{ hPa} - x) + x = 800 \text{ hPa} \Rightarrow x = 399 \text{ hPa}$$

Damit lauten die GG-Partialdrücke:

$$p(\text{CO}) = 666 \text{ hPa} - 399 \text{ hPa} = 267 \text{ hPa}, p(\text{Cl}_2) = 533 \text{ hPa} - 399 \text{ hPa} = 134 \text{ hPa}, p(\text{COCl}_2) = 399 \text{ hPa}$$

b)	CO	+	Cl ₂	=	COCl ₂
zu Beginn [hPa]	666		533		0
bei vollständigem Stoffumsatz [hPa]	666-533		533-533		533

$$p_{\text{gesamt}} = (666 \text{ hPa} - 533 \text{ hPa}) + (533 \text{ hPa} - 533 \text{ hPa}) + 533 \text{ hPa} = 666 \text{ hPa}$$

$$\text{c) } K_p = \frac{p(\text{COCl}_2)}{p(\text{CO}) \cdot p(\text{Cl}_2)} = \frac{399 \text{ hPa}}{267 \text{ hPa} \cdot 134 \text{ hPa}} \approx 0,011152 \text{ hPa}^{-1} \approx 0,011152 \frac{1}{\text{hPa}} \approx 0,011152 \frac{1}{100 \text{ Pa}} \approx 1,1152 \cdot 10^{-4} \text{ Pa}$$

Nr. 1.6

$$\text{a) } K_c = \frac{c(\text{Fe}^{3+})}{c(\text{Fe}^{2+}) \cdot c(\text{Ag}^+)} = \frac{0,06 \frac{\text{mol}}{\text{L}}}{0,04 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,08 \frac{\text{mol}}{\text{L}}} = 18,75 \frac{\text{L}}{\text{mol}}$$

b)

	Fe^{2+}	+	Ag^+	=	Fe^{3+}	+	Ag (s)
zu Beginn [mol/L]	?		?		0,1		-
im GG [mol/L]	0,04		0,08		0,06		-

Durch die Reaktion senkt sich die Fe^{3+} -Konzentration um 0,04 mol/L (0,1 mol/L – 0,06 mol/L). Wegen dem Koeffizientenverhältnis (jeweils 1:1) gilt:

- Es haben sich 0,04 mol/L Ag^+ bei GG-Einstellung neu gebildet. => Da im GG dann 0,08 mol/L vorliegen, müssen zum Beginn $c_0(\text{Ag}^+) = 0,04$ mol/L vorgelegen haben.
- Es haben sich 0,04 mol/L Fe^{2+} bei GG-Einstellung neu gebildet. => Da im GG 0,04 mol/L vorliegen, müssen zum Beginn $c_0(\text{Fe}^{2+}) = 0,0$ mol/L vorgelegen haben.

Nr. 1.7

Das MWG gilt nur für Konzentrationen im Gleichgewicht (GG). So dürfen nicht einfach die angegebenen Anfangskonzentrationen eingesetzt werden!

	H_2	+	I_2	⊕	2HI
zu Beginn [mol/L]	$11,2 \cdot 10^{-3}$		$10,0 \cdot 10^{-3}$		0
im GG [mol/L]	$3,0 \cdot 10^{-3}$		$1,8 \cdot 10^{-3}$		$16,4 \cdot 10^{-3}$ (Erklärung siehe unten)

Koeffizientenverhältnis: **1** + **1** = **2**

Aus dem Koeffizientenverhältnis geht hervor, dass sich doppelt so viel HI bildet, wie I_2 verbraucht werden (**1 : 2**). Wenn z.B. 1 mol I_2 verbraucht wird, dann bilden sich 2 mol HI. Wenn $16,4 \cdot 10^{-3}$ mol/L HI gebildet wurden, dann muss also halb so viel I_2 verbraucht worden sein: $8,2 \cdot 10^{-3}$ mol/L. Auch der Verbrauch an H_2 beträgt $8,2 \cdot 10^{-3}$ mol/L, da auch hier das Koeffizientenverhältnis (**1 : 2**) beträgt. .

Konzentrationen im GG = Anfangskonzentration – Verbrauch

$$c(\text{I}_2)_{\text{GG}} = 10,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L} - 8,2 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L} = 1,8 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$$

$$c(\text{H}_2)_{\text{GG}} = 11,2 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L} - 8,2 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L} = 3,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$$

$$K_c = \frac{c^2(\text{HI})}{c(\text{H}_2) \cdot c(\text{I}_2)} = \frac{(16,4 \cdot 10^{-3})^2 \frac{\text{mol}^2}{\text{L}^2}}{3,0 \cdot 10^{-3} \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 1,8 \cdot 10^{-3} \frac{\text{mol}}{\text{L}}} \approx 49,81$$

Nr. 1.8

	N_2	+	O_2	⊕	2NO
Vor Reaktionsbeginn	0,5 mol/L		0,75 mol/L		
Nach Gleichgewichtseinstellung [mol/L]	0,5-x		0,75-x		2x

$$\text{MWG } 3 \cdot 10^{-3} = \frac{(2x)^2}{(0,5-x)(0,75-x)} \Rightarrow 3 \cdot 10^{-3} = \frac{4x^2}{x^2 - 1,25x + 0,375} \Rightarrow -3,997x^2 - 0,00375x + 0,001125 = 0$$

Lösung der quadratischen Gleichung:

$$x_{1,2} = \frac{0,00375 \pm \sqrt{1,40625 \cdot 10^{-5} + 0,0179865}}{-7,994}$$


$$x_1 \approx -0,01725 \quad x_2 \approx 0,01631$$

$$c(\text{NO}) = 2 \cdot x \quad \hat{=} \quad c(\text{NO}) \approx 0,0326 \text{ mol/L}$$


$$c(\text{N}_2) = 0,5 - x \quad \hat{=} \quad c(\text{N}_2) \approx 0,4837 \text{ mol/L}$$

$$c(\text{O}_2) = 0,75 - x \quad \hat{=} \quad c(\text{O}_2) \approx 0,7337 \text{ mol/L}$$


Nr. 1.9

a)	Essigsäure	+	Ethanol		Ester	+	Wasser
Vor Reaktionsbeginn [mol/L]	1		1		0		0
Nach Gleichgewichtseinstellung [mol/L]	1-0,667 = 0,33		1-0,667 = 0,33		0,667		0+0,667 = 0,667

$$K_c = \frac{c(\text{Ester}) \cdot c(\text{Wasser})}{c(\text{Essigsäure}) \cdot c(\text{Ethanol})} = \frac{0,667 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,667 \frac{\text{mol}}{\text{L}}}{0,333 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot 0,333 \frac{\text{mol}}{\text{L}}} \approx 4,01$$

b) Legt man die gleichen Stoffmengen, diesmal aber als Edukte vor, so werden die gleichen Gleichgewichtskonzentration bzw. Gleichgewichtsstoffmengen erhalten. Diesmal wird der Gleichgewichtszustand von der rechten Reaktionsseite aus erhalten. Begründung: Hier gilt der gleiche Sachverhalt wie beim im Unterricht durchgeführten Modellversuch zum chemischen Gleichgewicht (A  B). Wie dort, so gilt auch hier ein 1:1-Koeffizientenverhältnis. Es ist hierbei jedoch wichtig, dass die vorgelegte Stoffmenge gleichmäßig auf den Ester und Wasser verteilt wird (also hier 1 mol Ester und 1 mol Wasser).

c)

a)	Essigsäure	+	Ethanol		Ester	+	Wasser
Vor Reaktionsbeginn [mol/L]	0,2		1,3333		6,6667		0,3333
Nach Gleichgewichtseinstellung [mol/L]	0,2-x		1,3333-x		6,6667+x		0,3333+x

$$4,01 = \frac{(6,6667+x) \cdot (0,3333+x)}{(0,2-x) \cdot (1,3333-x)} \Rightarrow \text{Lösung der quadratischen Gleichung}$$

$\Rightarrow x_1 = -0,0859758$ und $x_2 = 4,45426$. x_2 ist chemisch nicht interpretierbar.

Mit x_1 folgt $c(\text{Essigsäure}) = 0,286 \text{ mol/L}$, $c(\text{Ethanol}) = 1,419 \text{ mol/L}$, $c(\text{Ester}) = 6,581 \text{ mol/L}$ und

$c(\text{Wasser}) = 0,247 \text{ mol/L}$

1.10

	2 NOCl	\rightarrow	2 NO	+	Cl ₂
Vor Reaktionsbeginn [mol/L]	2		0		0

Nach Gleichgewichtseinstellung [mol/L] 2-2x 2x x

$$0,000444 = \frac{(2x)^2 \cdot x}{2-2x} \Rightarrow$$

$$0,00088 - 0,000888x = (2x)^2 \cdot x \Rightarrow$$

$$0,000888 - 0,000888x = 4x^3 \Rightarrow$$

$$0 = 4x^3 + 0x^2 + 0,000888x - 0,000888$$

=> Computeralgebra oder Solve-Funktion des Taschenrechners

$x_1 = 0,0593 \text{ mol/L}$ ist die einzige Lösung im Zahlenraum der reellen Zahlen. x_2 und x_3 sind nicht interpretierbar (komplexe Zahlen).

Mit x_1 lässt sich also angeben: $c(\text{NOCl}) = 1,8814 \text{ mol/L}$, $c(\text{NO}) = 0,1186 \text{ mol/L}$ und $c(\text{Cl}_2) = 0,0593 \text{ mol/L}$

1.11

	PCl_5	\rightleftharpoons	PCl_3	+	Cl_2
Vor Reaktionsbeginn [mol/L]	0,04		0,01		0
Nach Gleichgewichtseinstellung [mol/L]	0,04-x		0,01+x		x

$$0,9 = \frac{(0,01+x) \cdot x}{0,04-x} \Rightarrow x^2 + 0,91x - 0,036 = 0 \Rightarrow \text{Mitternachtsformel} \Rightarrow \begin{matrix} x_1 \approx 0,03978 \\ x_2 \approx -0,94798 \end{matrix}$$

Gleichgewichtskonzentration $c(\text{Cl}_2) = x \approx 0,03978 \text{ mol/L}$

$$n(\text{Cl}_2) = c(\text{Cl}_2) \cdot V \approx 0,03798 \text{ mol}$$

$$m(\text{Cl}_2) = n(\text{Cl}_2) \cdot M(\text{Cl}_2) \approx 0,03798 \text{ mol} \cdot 70,91 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \approx 2,7 \text{ g}$$

2.1

a)	H_2	+	I_2	\rightleftharpoons	2 HI
zu Beginn (in mol/L):	1		1		0
im GG (in mol/L):	1-x		1-x		2x

$$5 = \frac{(2x)^2}{(1-x)^2} \Rightarrow 5(1-2x+x^2) = 4x^2 \Rightarrow 5-10x+5x^2 = 4x^2 \Rightarrow x^2 - 10x + 5 = 0 \Rightarrow x_1 \approx 9,472 \text{ und } x_2 \approx 0,528$$

x_1 scheidet aus aus, da GG-Konzentrationen nicht werden können.

GG-Konzentrationen: $c(\text{H}_2) = c(\text{I}_2) = 1 - x_2 \approx 0,472 \text{ mol/L}$. $c(\text{HI}) = 2 \cdot x_2 = 1,056 \text{ mol/L}$

b) Nach dem Prinzip des kleinen Zwangs verschiebt sich das Gleichgewicht auf die rechte Seite. Das heißt die GG-Konzentration von HI wird größer sein, die von I_2 wird kleiner sein als bei a). Die Berechnung erfolgt analog zur Aufgabe a)

a)	H_2	+	I_2	\rightleftharpoons	2 HI
zu Beginn (in mol/L):	2		1		0
im GG (in mol/L):	2-x		1-x		2x

$$5 = \frac{(2x)^2}{(2-x) \cdot (1-x)} \Rightarrow 5 = \frac{(2x)^2}{2-2x-1x+x^2} \Rightarrow 5(2-3x+x^2) = 4x^2 \Rightarrow 10-15x+5x^2 = 4x^2 \Rightarrow x^2-15x+10=0$$

$$\Rightarrow x_1 \approx 14,301 \text{ und } x_2 \approx 0,699$$

GG-Konzentrationen: $c(\text{H}_2) = 2 - x_2 \approx 1,301 \text{ mol/L}$. $c(\text{I}_2) = 1 - x_2 \approx 0,301$ und $c(\text{HI}) = 2 \cdot x_2 = 1,398 \text{ mol/L}$

(man vergleiche mit den Aussagen des Prinzips des kleinen Zwangs!)

2.2

- a) $2 \text{ SO}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2 \text{ SO}_3$; A) nach links, da in diese Richtung endotherm B) nach links, da dort mehr Gasteilchen
- b) $\text{Ca}(\text{OH})_2 \rightleftharpoons \text{Ca}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}(\text{g})$; A) nach rechts, da in diese Richtung endotherm B) nach rechts, da dort mehr Gasteilchen
- c) $\text{CO} + 2 \text{ H}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{OH}(\text{g})$; A) nach links, da in diese Richtung endotherm B) nach links, da dort mehr Gasteilchen
- d) $\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$; A) nach rechts, da in diese Richtung endotherm B) indifferent, da links und rechts gleiche Anzahl Gasteilchen

2.3

$\text{O}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{O}_2(\text{l})$; $\Delta H < 0 \text{ kJ}$

Durch Abkühlen verschiebt sich das GG auf die exotherme Seite, d.h. nach rechts. Erhöht man den Druck, verschiebt sich das GG auf die Seite mit weniger Gasteilchen, also ebenfalls die rechts Seite. Beide Maßnahmen begünstigen also die Verflüssigung.

2.4

- a) $\text{N}_2 + 3 \text{ H}_2 \rightleftharpoons 2 \text{ NH}_3$; $\Delta H < 0 \text{ kJ}$, hoher Druck und tiefe Temperatur verschieben nach rechts
- b) Tiefe Temperatur senkt die Reaktionsgeschwindigkeit, so dass die Stundenausbeute sinkt (auch wenn die GG-Lage günstiger wird). \Rightarrow Verwendung von Katalysator (spezielle reaktive Eisenphase in Begleitung von Hilfsstoffen, die *in situ* aus Magnetit, Fe_3O_4 durch Reduktion entsteht).

3.1

	2 H ₂ O	→	2 H ₂	+	O ₂	
Stoffmengenanteil zu Beginn:	100%		0%		0%	
Stoffmengenanteil im GG	98,23%		1,77%		0,885%	Σ: 100,885% (≙ 1,000 bar)
100%: Anfangsstoffmenge						
GG-Partialdrücke (über Stoffmengenanteile berechnet):	0,974 bar		0,018 bar		0,009 bar	Stoffmengenanteil im GG: χ(H ₂ O) = 97,4%

b)

$$K_p = \frac{p^2(\text{H}_2) \cdot p(\text{O}_2)}{p(\text{H}_2\text{O})} = \frac{(0,018\text{bar})^2 \cdot 0,009\text{bar}}{(0,974\text{bar})^2} \approx 3,07 \cdot 10^{-6} \text{ bar}$$

$$K_c = \frac{K_p}{(RT)^{\Delta n}} = \frac{3,07 \cdot 10^{-6} \text{ bar}}{(0,08314 \frac{\text{L} \cdot \text{bar}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \cdot 2530\text{K})^1} \approx 14,61 \cdot 10^{-9} \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

d)

	2 H ₂ O	→	2 H ₂	+	O ₂	
Partialdrücke vor GG-Einstellung	?		0 bar		0 bar	
GG-Partialdrücke im GG:	p(H ₂ O)		0 + 2x		0 + x	Der Partialdruck von O ₂ ist halb so groß wie der von H ₂ .
Die Summe aller Partialdrücke ergibt 2,000 bar:						p(H ₂ O) + 2x + x = 2 bar \Rightarrow p(H ₂ O) = 2-3x

Anwendung des Massenwirkungsgesetz: $3,07 \cdot 10^{-6} \text{ bar} = \frac{(2x)^2 \cdot x}{p^2(\text{H}_2\text{O})} \Rightarrow 3,07 \cdot 10^{-6} \text{ bar} = \frac{(2x)^2 \cdot x}{(2-3x)^2} \Rightarrow$

$$3,07 \cdot 10^{-6} \text{ bar} = \frac{4x^3}{4-12x+9x^2} \Rightarrow 3,07 \cdot 10^{-6} (4-12x+9x^2) = 4x^3 \Rightarrow$$

$$-4x^3 + 27,63 \cdot 10^{-6} \cdot x^2 - 36,84 \cdot 10^{-6} x + 12,28 \cdot 10^{-6} = 0 \Rightarrow x_1 = 0,0143 \Rightarrow p(\text{H}_2\text{O}) = 2 - 3 \cdot 0,0143 \approx 1,957 \text{ bar}. \chi(\text{H}_2\text{O}) = 97$$

3. 2.

a) $\text{Fe}^{3+} + 4 \text{Cl}^- \rightarrow [\text{FeCl}_4]^-$. Es handelt sich um eine Lewis-Säure-Base-Reaktion. Die Lewis-Säure ist der Elektronenpaarakzeptor, hier also Fe^{3+} . Die Lewis-Base ist der Elektronenpaardonator, hier also Cl^- .

c) $c(\text{Fe}^{3+})$ nimmt zu, weil die endotherme Reaktionsrichtung begünstigt wird.

d) K_c ist konzentrationsunabhängig. Keine Veränderung.

b)	Fe^{3+}	+	4Cl^-	\rightarrow	$[\text{FeCl}_4]^-$
zu Beginn [mol/L]	0,250		0,500		0
Veränderung	-0,035		- 4*		+ 0,035
nach GG-Einstellung [mol/L]	0,215		0,360		0,035

$$K_c = \frac{c([\text{FeCl}_4]^-)}{c(\text{Fe}^{3+}) \cdot c^4(\text{Cl}^-)} = \frac{0,035 \frac{\text{mol}}{\text{L}}}{0,215 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \cdot (0,360 \frac{\text{mol}}{\text{L}})^4} \approx 9,69 \frac{\text{L}^4}{\text{mol}^4}$$