



EUROPA-FACHBUCHREIHE
für Chemieberufe

Technische Mathematik für Chemieberufe

Grundlagen

Eckhard Ignatowitz, Henrik Althaus, Holger Rapp

7. Auflage

VERLAG EUROPA-LEHRMITTEL · Nourney, Vollmer GmbH & Co. KG
Düsseldorfberger Straße 23 · 42781 Haan-Gruiten

Europa-Nr. 71314

Autoren:

Dr. Henrik Althaus, OStR	Stade
Dr. Eckhard Ignatowitz, StR a.D.	Waldbronn
Dipl.-Ing., Dipl.-Wirt.-Ing. Holger Rapp	Waldbronn
Autoren bis zur 5. Auflage	
Gew.-Lehrer Gerhard Fastert, OStR †	Stade
Dr. Klaus Brink, a.D. OStR †	Leverkusen

Leitung des Arbeitskreises und Lektorat:

Dr. Eckhard Ignatowitz

Bildentwürfe: Die Autoren

Bildbearbeitung:

Zeichenbüro des Verlags Europa-Lehrmittel, Ostfildern

7. Auflage 2022

Druck 5 4 3 2

Alle Drucke derselben Auflage sind parallel einsetzbar, da sie bis auf die Korrektur von Druckfehlern identisch sind.

ISBN 978-3-8085-8400-2

Alle Rechte vorbehalten. Das Werk ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der gesetzlich geregelten Fälle muss vom Verlag schriftlich genehmigt werden.

© 2022 by Verlag Europa-Lehrmittel, Nourney, Vollmer GmbH & Co. KG, 42781 Haan-Gruiten

Satz: Satz+Layout Werkstatt Kluth GmbH, 50374 Erftstadt

Umschlaggestaltung: braunwerbeagentur, Radevormwald

Umschlagbild: ©Michael-stock.adobe.com

Druck: Nikolaus Bastian Druck und Verlag GmbH, 54343 Föhren

Vorwort

Das Buch **TECHNISCHE MATHEMATIK FÜR CHEMIEBERUFE** ist ein Lehr-, Lern- und Übungsbuch für die schulische und betriebliche Ausbildung im Unterrichtsfach Technische Mathematik.

Es ist besonders für die Ausbildung in den Produktionsberufen der chemischen Industrie geeignet: zum Chemikant und zur Produktionsfachkraft Chemie.

Darüber hinaus kann es für die Ausbildung zur Fachkraft für Wasserversorgungstechnik bzw. Abwassertechnik, für Papiermacher, für Textilreiniger und Färberei-Textilveredler sowie verschiedene Laborberufe verwendet werden.

Hilfreich kann es auch an Berufsfachschulen, Fachoberschulen, Meister-Fachschulen, Chemotechniker-Fachschulen und bei Weiterbildungskursen in der chemischen Industrie eingesetzt werden.

Zudem bietet es eine fachmathematische Einführung für ein Chemie- bzw. Chemie-Ingenieurstudium.

Das Buch vermittelt neben mathematischen Grundkenntnissen vor allem berufsbezogene fachmathematische Kenntnisse aus den Bereichen allgemeine Chemie und analytische Chemie, technikorientierte Sachgebiete aus der Chemie, Physik sowie Messtechnik.

Die Stoffauswahl basiert auf dem Rahmenlehrplan der Kultusministerkonferenz sowie den Lehrplänen der Bundesländer des Ausbildungsberufes Chemikant. Darüber hinaus wurden Ergänzungen für die anderen Berufe und Schularten aus dem Berufsfeld Chemie aufgenommen.

Die Kapitel des Buches lauten:

- | | |
|--|--|
| 1 Mathematische Grundlagen, praktisches Rechnen | 7 Analytische Bestimmungen |
| 2 Auswertung von Messwerten und Prozessdaten | 8 Berechnungen zur Elektrizitätslehre |
| 3 Ausgewählte physikalische Berechnungen | 9 Berechnungen zur Wärmelehre |
| 4 Stöchiometrische Berechnungen | 10 Bestimmung von Produkteigenschaften |
| 5 Rechnen mit Gehaltsgrößen von Mischungen | 11 Qualitätssicherung |
| 6 Berechnungen zum Verlauf chemischer Reaktionen | |

Die Lerninhalte sind nach einem einheitlichen methodischen Grundkonzept dargeboten:

Nach einer kurzen Einführung in die theoretischen Sachverhalte werden die zur Berechnung erforderlichen Größengleichungen abgeleitet oder gegeben und die Einheiten der physikalischen Größen erläutert.

Darauf folgt die ausführliche Darstellung des Rechengangs an ein oder zwei typischen Aufgabenbeispielen. Zum eigenständigen Üben steht eine umfangreiche Sammlung von Aufgaben zum gerade dargebotenen Lerninhalt zur Verfügung.

Am Ende jedes Großkapitels folgt eine Zusammenstellung von gemischten Aufgaben, die zur Leistungskontrolle oder zur Prüfungsvorbereitung verwendet werden können.

Beim chemischen Rechnen wird als Lösungsmethode überwiegend das Rechnen mit Größengleichungen eingesetzt. Aber auch das Schlussrechnen wird eingeführt und in dafür typischen Aufgabenbeispielen durchgerechnet.

Das Buch ist durchgängig auf die Verwendung von Taschenrechner und PC konzipiert. Dabei werden das Runden und das Rechnen mit den signifikanten Ziffern eingeführt und im ganzen Buch konsequent berücksichtigt. Auch die Prozessdatenauswertung und die grafische Darstellung mit dem Tabellenkalkulationsprogramm Excel wird an berufstypischen Beispielen geübt.

Das Buch hat ein ausführliches Sachwortverzeichnis mit der englischen Übersetzung der Fachausdrücke. Es kann als **Sachwort-Lexikon** genutzt werden.

In der vorliegenden **7. Auflage** des Buches wurden eine Reihe von Verbesserungen durchgeführt:

- Das Layout wurde nochmals verbessert, um die schnelle Erfassung der Inhalte zu erleichtern.
- Im ganzen Buch wurden die Aufgaben noch stärker an den berufsspezifischen Inhalten ausgerichtet.
- Satzfehler wurden korrigiert.

Zum Buch **TECHNISCHE MATHEMATIK FÜR CHEMIEBERUFE** gibt es ein **Lösungsbuch**, EUROPA-Nr. 71411, in dem für alle Aufgaben ein Lösungsvorschlag mit Ergebnis durchgerechnet ist.

Die Autoren und der Verlag freuen sich über kritisch-konstruktive Hinweise und Verbesserungsvorschläge zum Buch. Bitte richten Sie Ihre Zuschrift per e-mail an: Lektorat@europa-lehrmittel.de

Die Autoren

Sommer 2022

Inhaltsverzeichnis

1	Mathematische Grundlagen, praktisches Rechnen.	8	2.3.3	Standardabweichung	42
			2.3.4	Gauß'sche Normalverteilung	43
1.1	Zahlenarten	8	2.3.5	Auswertung mit dem Taschenrechner und Computer	43
1.2	Größen, Einheiten, Zeichen, Formeln	9	2.4	Darstellung von Messergebnissen	45
1.3	Grundrechnungsarten	10	2.4.1	Messwerte in Wertetabellen	45
1.3.1	Addieren und Subtrahieren	10	2.4.2	Grafische Darstellung von Messwerten	46
1.3.2	Multiplizieren	11	2.4.3	Arbeiten mit Diagrammen in der Chemietechnik	48
1.3.3	Dividieren	12	2.4.4	Funktionsgraphen	50
1.4	Berechnen zusammengesetzter Ausdrücke	13	2.4.5	Linearisieren einer Kurve	52
1.5	Bruchrechnen	14	2.4.6	Verwendung grafischer Papiere	53
1.5.1	Addieren und Subtrahieren von Brüchen	14	2.5	Versuchs- und Prozessdatenauswertung mit dem Computer	55
1.5.2	Multiplizieren und Dividieren von Brüchen	15	2.5.1	Das Tabellenkalkulationsprogramm Excel	55
1.6	Rechnen mit Potenzen	16	2.5.2	Auswertung von Messreihen mit Excel	57
1.7	Rechnen mit Wurzeln	18	2.5.3	Diagramme zeichnen mit Excel	60
1.8	Rechnen mit Logarithmen	20	2.5.4	Regressionsanalyse mit Excel	64
1.8.1	Definition des Logarithmus	20		Gemischte Aufgaben zu Kapitel 2	66
1.8.2	Berechnen dekadischer Logarithmen	21			
1.8.3	Berechnen natürlicher Logarithmen	21			
1.8.4	Logarithmengesetze	22			
1.8.5	Logarithmieren bei der pH-Wert-Berechnung	22			
1.9	Lösen von Gleichungen	23			
1.9.1	Lösen von Bestimmungsgleichungen	23			
1.9.2	Lösen von Größengleichungen	24			
1.10	Rechnen mit Winkeln und Winkelfunktionen	25			
1.11	Berechnungen mit dem Dreisatz	26			
1.12	Berechnungen mit Proportionen	27			
1.13	Berechnungen mit Anteilen	28			
	Gemischte Aufgaben zu Kapitel 1	29			
2	Auswertung von Messwerten und Prozessdaten	32	3	Ausgewählte physikalische Berechnungen	69
2.1	Messtechnik in der Chemieanlage	32	3.1	Größen, Zeichen, Einheiten, Umrechnungen	69
2.1.1	Grundbegriffe der Messtechnik	32	3.2	Berechnung von Längen, Flächen, Oberflächen und Volumina	74
2.1.2	Unsicherheit von Messwerten	33	3.2.1	Längenberechnung	74
2.1.3	Messgenauigkeit im Labor und Chemiebetrieb	34	3.2.2	Umfangs- und Flächenberechnung	75
2.2	Rechnen mit Messwerten	38	3.2.3	Oberflächen- und Volumenberechnung	76
2.2.1	Signifikante Ziffern	38	3.3	Berechnung von Masse, Volumen und Dichte	78
2.2.2	Runden	38	3.4	Bewegungsvorgänge	82
2.2.3	Rechnen mit Messwerten ohne angegebene Unsicherheit	39	3.5	Strömende Medien in Rohrleitungen	85
2.2.4	Rechnen mit Messwerten mit angegebener Unsicherheit	40	3.6	Kräfte	87
2.3	Auswertung von Messwertreihen	41	3.7	Arbeit	90
2.3.1	Statistische Kennwerte	41	3.8	Leistung	92
2.3.2	Absoluter und relativer Fehler	41	3.9	Energie	93
			3.10	Wirkungsgrad	94
			3.11	Druck und Druckarten	96
			3.12	Druck in Flüssigkeiten	97
			3.13	Auftriebskraft	99
			3.14	Druck in Gasen, Gasgesetze	101
			3.15	Sättigungsdampfdruck, Partialdruck	103
			3.16	Luftfeuchtigkeit	104
				Gemischte Aufgaben zu Kapitel 3	106

4	Stöchiometrische Berechnungen	108	5.1.2	Volumenanteil φ	153
4.1	Grundgesetze der Chemie	108	5.1.3	Stoffmengenanteil χ	154
4.2	Aufbau der chemischen Elemente	108	5.1.4	Umrechnen der verschiedenen Anteile	155
4.3	Symbole und Ziffern in chemischen Formeln	110	5.1.5	Massenkonzentration β	157
4.4	Quantitäten von Stoffportionen	111	5.1.6	Volumenkonzentration σ	158
4.4.1	Stoffmenge	111	5.1.7	Stoffmengenkonzentration c und Äquivalentkonzentration $c(1/z \cdot X)$	159
4.4.2	Molare Masse	112	5.1.8	Umrechnen der verschiedenen Konzentrationen	160
4.4.3	Atomare Masseneinheit	113	5.1.9	Löslichkeit L^*	161
4.5	Zusammensetzung von Verbindungen und Elementen	114		Gemischte Aufgaben zu Gehaltsgrößen	163
4.5.1	Massenanteile von Bestandteilen in Verbindungen	114	5.2	Umrechnen von Anteilen in Konzentrationen und Löslichkeiten	164
4.5.2	Masse der Bestandteile in Portionen von Verbindungen	114	5.2.1	Umrechnung von Massenanteil $w(X)$ und Stoffmengenkonzentration $c(X)$	164
4.5.3	Zusammensetzung von Isotopengemischen	115	5.2.2	Umrechnung von Massenanteil $w(X)$ und Massenkonzentration $\beta(X)$	165
4.6	Empirische Formel, Molekülformel (Teilchenformel)	116	5.2.3	Umrechnung von Massenanteil $w(X)$ und Volumenkonzentration $\sigma(X)$	165
4.6.1	Berechnung der empirischen Formel einer Verbindung	117	5.2.4	Umrechnung von Massenanteil $w(X)$ und Löslichkeit $L^*(X)$	166
4.6.2	Berechnung der Molekülformel einer Verbindung	118	5.3	Gehaltsgrößen beim Mischen, Verdünnen und Konzentrieren von Lösungen	169
4.6.3	Ermittlung der Molekülformel mit der Elementaranalyse	119	5.3.1	Mischen von Lösungen	169
4.7	Berechnungen mit Gasportionen	120	5.3.2	Verdünnen von Lösungen	171
4.7.1	Gase bei Normbedingungen	120	5.3.3	Volumenberechnung beim Mischen von Lösungen	172
4.7.2	Gasportionen bei beliebigen Drücken und Temperaturen	122	5.3.4	Konzentrieren von Lösungen	173
4.7.3	Bestimmung der molaren Masse aus der allgemeinen Gasgleichung	124		Gemischte Aufgaben zu Kapitel 5	174
4.7.4	Dichte einer Gasportion	125			
4.8	Rechnen mit Reaktionsgleichungen	126	6	Berechnungen zum Verlauf chemischer Reaktionen	176
4.8.1	Aufbau von Reaktionsgleichungen	126	6.1	Reaktionsgeschwindigkeit	176
4.8.2	Aufstellen von Reaktionsgleichungen	128	6.2	Beeinflussung der Reaktionsgeschwindigkeit	179
4.8.3	Oxidationszahlen	131	6.2.1	Einfluss der Konzentration	179
4.8.4	Aufstellen von Redox-Gleichungen	133	6.2.2	Einfluss der Temperatur auf die Reaktionsgeschwindigkeit	181
	Gemischte Aufgaben zum Rechnen mit Reaktionsgleichungen	136	6.2.3	Einfluss von Katalysatoren auf die Reaktionsgeschwindigkeit	183
4.9	Umsatzberechnung bei chemischen Reaktionen	137	6.3	Chemisches Gleichgewicht	184
4.9.1	Umsatzberechnung bei Einsatz reiner Stoffe	137	6.4	Massenwirkungsgesetz	185
4.9.2	Umsatzberechnung bei Einsatz verunreinigter oder gelöster Stoffe	139	6.5	Verschiebung der Gleichgewichtslage	187
4.9.3	Umsatzberechnung bei Gasreaktionen	142	6.6	Protolysegleichgewichte	191
4.9.4	Umsatzberechnung unter Berücksichtigung der Ausbeute	144	6.6.1	Protolysegleichgewicht des Wassers	192
	Gemischte Aufgaben zur Umsatzberechnung	147	6.6.2	Der pH-Wert	193
			6.6.3	pH-Wert starker Säuren und Basen	194
			6.6.4	pH-Wert schwacher Säuren und Basen	195
5	Rechnen mit Gehaltsgrößen von Mischungen	149	6.7	pH-Wert von Pufferlösungen	198
5.1	Gehaltsgrößen von Mischungen	149	6.8	Löslichkeitsgleichgewichte	199
5.1.1	Massenanteil w	151		Gemischte Aufgaben zu Kapitel 6	200

7	Analytische Bestimmungen	201			
7.1	Thermogravimetrische Analysen	202	7.8.2	Säulenchromatografie	246
7.1.1	Feuchtigkeits- und Trockengehaltsbestimmungen von Feststoffen	202	7.8.3	Kenngößen der Chromatografie	248
7.1.2	Glührückstandsbestimmungen	203	7.8.4	Trennwirkung einer chromatografischen Säule	249
7.1.3	Bestimmung des Wassergehalts in Mineralölen	204	7.8.5	Auswertung säulenchromatografischer Analysen	250
	Gemischte Aufgaben zu 7.1		7.8.5.1	Auswertung eines Chromatogramms mit der 100% – Methode	251
	Thermogravimetrischen Analysen	205	7.8.5.2	Auswertung eines Chromatogramms mit externem Standard	251
7.2	Volumetrische Bestimmungen (Maßanalyse)	206			
7.2.1	Durchführung einer Maßanalyse	206	8	Berechnungen zur Elektrotechnik	255
7.2.2	Maßanalyse mit aliquoten Teilen	206	8.1	Grundbegriffe der Elektrotechnik	255
7.2.3	Gehaltsangaben von Maßlösungen	207	8.2	Elektrischer Widerstand und Leitwert eines Leiters	257
7.2.4	Titer von Maßlösungen	208	8.3	Ohm'sches Gesetz	259
7.2.5	Neutralisationstitrationsen	210	8.4	Reihenschaltung von Widerständen	260
7.2.5.1	Direkttitrationsen	210	8.5	Parallelschaltung von Widerständen	262
7.2.5.2	Rücktitrationen	213	8.6	Gruppenschaltungen, Netzwerk- Schaltungen	264
7.3	Bestimmung von Abwasserkennwerten	215	8.7	Wheatstone'sche Brückenschaltung	266
7.3.1	Biochemischer Sauerstoffbedarf BSB	215	8.8	Thermische Widerstandsänderung, Widerstandsthermometer	267
7.3.2	Chemischer Sauerstoffbedarf CSB	219	8.9	Thermospannung, Thermoelement	268
7.4	Bestimmung der Wasserhärte	221	8.10	Widerstandsänderung eines Leiters durch Dehnung	270
7.4.1	Definition und Berechnung der Wasserhärte	221	8.11	Elektrische Arbeit, Leistung, Wirkungsgrad	271
7.4.2	Bestimmung der Wasserhärte durch komplexometrische Titration	222	8.12	Berechnungen zum Drehstrom	273
7.4.3	Bestimmung der Härtebereiche mit Teststreifen	224	8.12.1	Stern- und Dreieckschaltung	273
7.5	Bestimmung maßanalytischer Kennzahlen von Fetten	225	8.12.2	Leistungsschilder elektrischer Geräte (rating plates)	275
7.5.1	Säurezahl SZ	225	8.12.3	Elektrische Leistung bei verschiedenen Stromarten	275
7.5.2	Verseifungszahl VZ	226	8.13	Elektrolytische Stoffabscheidung	277
7.5.3	Esterzahl EZ	227	8.13.1	Elektrolytisch abgeschiedene Stoffmasse	277
7.6	Maßanalytische Bestimmungen mit elektrochemischen Methoden	228	8.13.2	Elektrolytische Abscheidung von Gasen	278
7.6.1	Potenzimetrische Neutralisationstitrationsen	228		Gemischte Aufgaben zu Kapitel 8	280
7.6.2	Leitfähigkeitstitrationsen (Konduktometrie)	230			
	Gemischte Aufgaben zu 7.2 bis 7.6				
	Maßanalytische Bestimmungen	231			
7.7	Optische Analyseverfahren	233	9	Berechnungen zur Wärmelehre	282
7.7.1	Fotometrie, Spektroskopie	233	9.1	Temperaturskalen	282
7.7.1.1	Physikalische Grundlagen	233	9.2	Verhalten der Stoffe bei Erwärmung	283
7.7.1.2	Optische Größen der Fotometrie/ Spektroskopie	234	9.2.1	Thermische Längenänderung von Feststoffen	283
7.7.1.3	Gesetz von Bouguer, Lambert und Beer	235	9.2.2	Thermische Volumenänderung von Feststoffen	284
7.7.1.4	Filterfotometrie	236	9.2.3	Thermische Volumenänderung von Flüssigkeiten	285
7.7.1.5	UV-VIS-Spektroskopie	238	9.2.4	Thermische Volumenänderung von Gasen	287
7.7.2	Refraktometrie	240	9.3	Wärmeinhalt von Stoffportionen	288
7.7.3	Polarimetrie	243			
7.8	Chromatografie	245			
7.8.1	Dünnschichtchromatografie und Papierchromatografie	245			

9.4	Aggregatzustandsänderungen	290
9.4.1	Schmelzen und Erstarren	290
9.4.2	Verdampfen, Kondensieren	291
9.4.3	Zusammengesetzte thermische Vorgänge	291
9.5	Siedepunkterhöhung	293
9.6	Gefrierpunktniedrigung	295
9.7	Temperaturänderung beim Mischen von Flüssigkeiten	296
9.8	Temperaturänderung beim direkten Heizen und Kühlen	298
9.9	Reaktionswärmen bei chemischen Reaktionen	300
9.10	Heizwert und Brennwert von Brennstoffen	304
	Gemischte Aufgaben zu Kapitel 9	306

10 Bestimmung von Produkteigenschaften 308

10.1	Bestimmung der Dichte	308
10.1.1	Dichtebestimmung mit dem Pyknometer	309
10.1.2	Dichtebestimmung mit der hydrostatischen Waage	312
10.1.3	Dichtemessung mit der Westphal'schen Waage	313
10.1.4	Dichtebestimmung mit dem Tauchkörper-Verfahren	314
10.1.5	Dichtemessung mit dem Aräometer	315
10.1.6	Dichtebestimmung mit Biegeschwinger-Messgeräten	316
10.2	Bestimmung technischer Dichten von Schüttgütern	318
10.2.1	Bestimmung der Schütt- und Rütteldichte	318
10.2.2	Bestimmung der Pressdichte	318
10.3	Bestimmung der Viskosität	320
10.3.1	Dynamische und kinematische Viskosität	320
10.3.2	Kugelfall-Viskosimeter nach Höppler	321
10.3.3	Auslauf-Viskosimeter	322
10.3.4	Rotations-Viskosimeter	323
10.4	Bestimmung der Oberflächenspannung	324
10.4.1	Bügelverfahren oder Ringverfahren	325
10.4.2	Tropfenmethode	325
10.4.3	Kapillarmethode	326
10.5	Bestimmung der Partikelgrößenverteilung von Schüttgütern	327
10.5.1	Auswertung einer Siebanalyse	327
10.5.2	Darstellung und Auswertung einer Siebanalyse im RRSB-Netz	329
10.5.3	Bestimmung der spezifischen Oberfläche von Schüttgütern	331

10.6	Auswertung einer Siebanalyse mit dem Tabellenkalkulationsprogramm Excel	332
10.6.1	Rechnerische Auswertung der Siebanalyse mit Excel	332
10.6.2	Erstellen von Diagrammen zur Siebanalyse mit Excel	333

11 Qualitätssicherung 335

11.1	Erfassung der Verteilung von Messwerten	335
11.2	Qualitätssicherung mit Qualitätsregelkarten	337
11.2.1	Aufbau und Funktion von Qualitätsregelkarten	337
11.2.2	Berechnen der Regelgrenzen bei Qualitätsregelkarten	339
11.2.3	Erstellen und Führen von Qualitätsregelkarten	341
11.3	Interpretation von Qualitätsregelkarten	342

12 Anhang 344

Griechische Buchstaben	344
Physikalische Konstanten	344
Vorsätze und Vorsatzzeichen	344
Symbole und molare Massen der Elemente	345
Hinweis zu den Normen	345
Kopiervorlagen	346
Millimeterpapier	346
Einfach-Logarithmen-Papier	347
Doppelt-Logarithmen-Papier	348
Vordruck zur Datenerfassung einer Siebanalyse	349
Histogramm	349
RRSB-Netz für die Siebanalyse	350
Qualitätsregelkarte	351

Sachwortverzeichnis mit englischen Sachwörtern 352

Danksagung und Bildquellenverzeichnis	360
--	-----

3.3 Berechnung von Masse, Volumen und Dichte

Beim Umgang mit Stoffen, z. B. beim Herstellen von Lösungen oder bei chemischen Reaktionen, werden die Stoffportionen genau abgemessen. Dies ist erforderlich, um z. B. Lösungen mit bestimmten Konzentrationen zu erhalten oder um Stoffportionen für eine Reaktion zu bestimmen.

Die Menge einer Stoffportion bezeichnet man als **Quantität**. Die Quantität einer Stoffportion kann durch die Masse oder bei Flüssigkeiten und Gasen durch das Volumen beschrieben werden.

■ Masse (mass)

Die Masse m ist eine Basisgröße mit der Basiseinheit Kilogramm und dem Einheitenzeichen kg.

Ein Kilogramm ist definiert als die Masse des Internationalen **Kilogrammprototyps** (Urkilogramm). Es ist ein Platin-Iridium-Zylinder von 39,00 mm Höhe und 39,00 mm Durchmesser.

Die Masse einer Stoffportion wird durch Wägung bestimmt (**Bild 1**). Befindet sich die Stoffportion in einer Verpackung, so bezeichnet man die gemessene Gesamtmasse als **Bruttomasse** m_B . Dies ist die Gesamtmasse des Gebindes einschließlich der Verpackung.

Die Masse der Verpackung wird als **Tara** m_T bezeichnet.

Die Masse der Stoffportion in der Verpackung nennt man **Nettomasse** m_N .

Für Bruttomasse, Nettomasse und Tara werden die üblichen Masseneinheiten verwendet, z. B. g oder kg. Die Tara kann auch in Prozent der Bruttomasse angegeben werden.

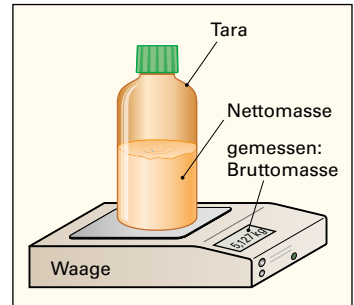


Bild 1: Massenangaben bei Gebinden

Bruttomasse			
Bruttomasse	=	Nettomasse	+ Tara
m_B	=	m_N	+ m_T

Beispiel: Ein 10-L-Gebinde mit Aceton $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$ hat eine Bruttomasse von 9,34 kg.

- Wie viel Kilogramm Aceton sind in dem Gebinde enthalten, wenn die Verpackung 0,43 kg wiegt?
- Wie groß ist die Tara in Prozent?

Lösung:

$$\begin{aligned} \text{a) } m_B &= m_N + m_T \\ &\Rightarrow m_N(\text{Aceton}) = m_B - m_T = 9,34 \text{ kg} - 0,43 \text{ kg} = \mathbf{8,91 \text{ kg}} \\ \text{b) } 9,34 \text{ kg} &\text{ entsprechen einer Tara von } 100 \% \\ 0,43 \text{ kg} &\text{ entsprechen einer Tara von } x \\ &\Rightarrow x = \frac{0,43 \text{ kg} \cdot 100 \%}{9,34 \text{ kg}} \approx \mathbf{4,60 \% \text{ Tara}} \end{aligned}$$

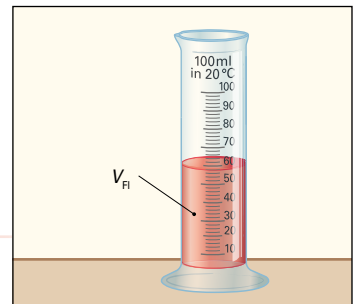


Bild 2: Messen des Flüssigkeitsvolumens mit dem Messzylinder

■ Volumen (volume)

Das Volumen V beschreibt den Rauminhalt eines Körpers oder eines Behälters. Es ist eine abgeleitete Größe mit der SI-Einheit Kubikmeter (Einheitenzeichen m^3). Die Bestimmung des Volumens V einer Stoffportion erfolgt auf verschiedene Weise:

- Bei geometrischen Körpern durch Berechnung (vgl. Seite 76).
- Bei unregelmäßig geformten Feststoffen durch geeignete Verdrängungsmethoden oder durch Berechnung aus Masse und Dichte.
- Bei Flüssigkeiten durch Volumenmessgeräte, z. B. Messzylinder (**Bild 2**).
- Bei Gasen durch Gasvolumen-Messgeräte, wie z. B. das **Gassammelrohr**, auch **Gasmaus** genannt (**Bild 3**).

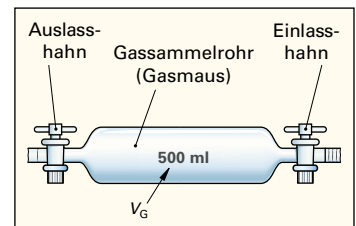


Bild 3: Messen des Gasvolumens mit der Gasmaus

■ Dichte (density)

Die Masse einer Stoffportion ist umso größer, je größer das Volumen der Stoffportion ist: $m \sim V$. Mit dem Proportionalitätsfaktor ϱ , der Dichte, erhält man die Größengleichung: $m = \varrho \cdot V$.

Umgestellt nach der Dichte ergibt sich die Definitionsgleichung der Dichte als Quotient aus Masse und Volumen (siehe rechts).

Der Stoff darf keine Hohlräume (Poren) besitzen. Diese Dichte bezeichnet man auch als **stoffspezifische Dichte**. Sie hat für einen Stoff einen bestimmten Wert (**Tabelle** unten) und wird in den Einheiten kg/m^3 oder g/cm^3 angegeben.

Der Größenwert der Dichte entspricht der Masse eines Würfels des Stoffs mit 1 cm^3 Volumen (**Bild 1**).

Beispiel: Die Masse von 500 mL Methanol in einem Messzylinder beträgt 396 g. Welche Dichte hat Methanol?

Lösung: $\varrho(\text{Methanol}) = \frac{m}{V} = \frac{396 \text{ g}}{500 \text{ mL}} = 0,792 \text{ g/mL} = \mathbf{0,792 \text{ g/cm}^3}$

Stoffspezifische Dichte

$$\text{Dichte} = \frac{\text{Masse}}{\text{Volumen}} ; \quad \varrho = \frac{m}{V}$$

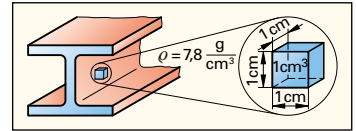


Bild 1: Dichte eines Stahlträgers

■ Technische Dichten (industrial densities)

Ein Feststoffkörper oder ein Flüssigkeitsvolumen mit vollständiger Raumerfüllung besitzt keine Poren oder sonstige Hohlräume. Seine Dichte wird mit der stoffspezifischen Dichte ϱ beschrieben (siehe oben).

In der Realität besitzen Feststoffe z.B. durch kleine Lufteinschlüsse (Poren) in den Feststoffpartikeln, eine bestimmte Porosität (**Bild 2**). Schüttgüter besitzen zusätzlich zwischen den Feststoffpartikeln Hohlräume, die durch die Form und Schichtung der Partikel verursacht werden. Poren und Partikelzwischenräume bewirken eine nur teilweise Raumerfüllung und damit eine geringere wirkliche Dichte (technische Dichte) als die stoffspezifische Dichte.

Zur Berechnung der Masse oder des Volumens von Feststoffschüttungen verwendet man deshalb die **Schüttdichte** $\varrho_{\text{Schütt}}$.

Die Größengleichung zur Berechnung der Schüttdichte $\varrho_{\text{Schütt}}$ ist der Quotient aus der Masse des Schüttguts $m_{\text{Schütt}}$ und dem Volumen des Schüttguts $V_{\text{Schütt}}$.

Wird die Schüttung zusätzlich durch Vibration oder Rütteln verdichtet, so bezeichnet man die erhaltene Dichte als **Rütteldichte** $\varrho_{\text{Rütt}}$.

Die nebenstehende **Tabelle** zeigt die stoffspezifischen und technischen Dichten einiger Schüttgüter.

Beispiel: Eine Feststoffschüttung in einem Becherglas hat folgende Maße: $d = 49,2 \text{ mm}$, $h = 38,0 \text{ mm}$. Die Masse der Schüttung beträgt 113,705 g. Wie groß ist die Schüttdichte?

Lösung:

$$\begin{aligned} V_{\text{Schütt}} &= \frac{\pi}{4} \cdot d^2 \cdot h \\ &= \frac{\pi \cdot (49,2 \text{ mm})^2 \cdot 38,0 \text{ mm}}{4} \\ &\approx 72244 \text{ mm}^3 \approx 72,224 \text{ cm}^3 \end{aligned}$$

$$\varrho_{\text{Schütt}} = \frac{m_{\text{Schütt}}}{V_{\text{Schütt}}} \approx \frac{113,705 \text{ g}}{72,224 \text{ cm}^3} \approx \mathbf{1,574 \text{ g/cm}^3}$$

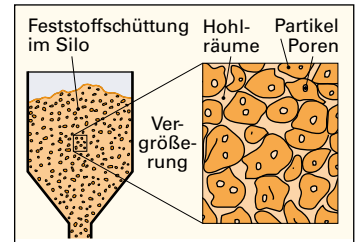


Bild 2: Innere Struktur einer Feststoffschüttung

Schüttdichte

$$\varrho_{\text{Schütt}} = \frac{m_{\text{Schütt}}}{V_{\text{Schütt}}}$$

Rütteldichte

$$\varrho_{\text{Rütt}} = \frac{m_{\text{Rütt}}}{V_{\text{Rütt}}}$$

Tabelle: Technische Dichten von Schüttgütern

Schüttgut	Stoffspez. Dichte g/cm^3	Schüttdichte g/cm^3	Rütteldichte g/cm^3
Quarzsand	2,7	1,5	1,7
Polystyrolgranulat	1,1	0,54	0,58
Aluminiumoxid	3,9	0,80	1,1
Zucker	1,6	0,88	0,99
Kalksteinmehl	2,9	1,1	1,3
Bauxit	2,5	1,05	1,35
Zement	3,1	1,24	1,80

■ Dichte von Stoffgemischen (density of mixtures)

Das Mischen ist eine wichtige verfahrenstechnische Grundoperation. Beim Mischen werden feste, flüssige oder gasförmige Stoffe so miteinander vereinigt, dass Gemische mit möglichst vollständig verteilten Substanzen entstehen. Typische Stoffgemische sind z.B.: Gemenge, Suspensionen, Emulsionen, Lösungen, Schäume, Pasten, Aerosole.

Wird die beim Mischen wegen der unterschiedlichen Teilchengröße der Mischkomponenten auftretende Volumenkontraktion oder -dilatation (Volumenverringern oder -vergrößerung) vernachlässigt, so setzt sich das Volumen des Gemisches V_M aus den Volumina der einzelnen Mischkomponenten V_1 , V_2 und V_n zusammen. Der Index n steht für eine beliebige Mischkomponente.

Für das Volumen der Mischung gilt:

$$V_M = V_1 + V_2 + V_n$$

Für die Masse der Mischung gilt analog:

$$m_M = m_1 + m_2 + m_n$$

Durch Einsetzen von $V = m/\rho$ bzw. $m = \rho \cdot V$ ergeben sich die nebenstehenden Näherungsgleichungen, mit denen sich Dichten, Massen und Volumina von Stoffgemischen oder Mischkomponenten näherungsweise berechnen lassen.

Beziehungen zwischen Massen, Volumen und Dichten von Stoffgemischen

$$\rho_1 \cdot V_1 + \rho_2 \cdot V_2 = \rho_M \cdot V_M$$

$$\frac{m_1}{\rho_1} + \frac{m_2}{\rho_2} = \frac{m_M}{\rho_M}$$

Beispiel: Ein Buntlack Bl enthält 380 g Bindemittel $\rho(\text{Bm}) = 1,13 \text{ g/cm}^3$, 260 g Pigment $\rho(\text{Pi}) = 3,81 \text{ g/cm}^3$ und 360 g Lackbenzin $\rho(\text{Lb}) = 0,771 \text{ g/cm}^3$. Welche mittlere Dichte hat der Buntlack?

Lösung: $\frac{m_{\text{Bm}}}{\rho_{\text{Bm}}} + \frac{m_{\text{Pi}}}{\rho_{\text{Pi}}} + \frac{m_{\text{Lb}}}{\rho_{\text{Lb}}} = \frac{m_{\text{Bl}}}{\rho_{\text{Bl}}} \Rightarrow \rho_{\text{Bl}} = \frac{m_{\text{Bm}}}{\frac{m_{\text{Bm}}}{\rho_{\text{Bm}}} + \frac{m_{\text{Pi}}}{\rho_{\text{Pi}}} + \frac{m_{\text{Lb}}}{\rho_{\text{Lb}}}}$ mit $m_{\text{Bl}} = m_{\text{Bm}} + m_{\text{Pi}} + m_{\text{Lb}}$ folgt

$$\rho_{\text{Bl}} = \frac{m_{\text{Bm}} + m_{\text{Pi}} + m_{\text{Lb}}}{\frac{m_{\text{Bm}}}{\rho_{\text{Bm}}} + \frac{m_{\text{Pi}}}{\rho_{\text{Pi}}} + \frac{m_{\text{Lb}}}{\rho_{\text{Lb}}}} = \frac{380 \text{ g} + 260 \text{ g} + 360 \text{ g}}{\frac{380 \text{ g}}{1,13 \text{ g/cm}^3} + \frac{260 \text{ g}}{3,81 \text{ g/cm}^3} + \frac{360 \text{ g}}{0,771 \text{ g/cm}^3}} \approx \frac{1000 \text{ g}}{(336,28 + 68,24 + 506,33) \text{ cm}^3}$$

$$\rho_{\text{Bl}} \approx 1,098 \text{ g/cm}^3$$

Aufgaben zur Berechnung von Masse, Volumen und Dichte

- 10,0 m³ Kalksteinmehl haben eine Masse von 11,0 t. Berechnen Sie die Schüttdichte des Kalksteinmehl.
- Ein Chloroform-Gebinde von 0,50 L hat eine Masse von 0,74 kg. Welche Dichte hat das Chloroform?
- Wie viele 100-mg-Tabletten können aus 6,50 m³ Arzneimittelgranulat mit einer Schüttdichte von $\rho_{\text{Schütt}} = 0,570 \text{ g/cm}^3$ gepresst werden?
- Ein 200-L-Rollreifenfass (**Bild 1**) mit einer Tara von 16,38 kg ist zu 90% mit Methanol der Dichte $\rho(\text{CH}_3\text{OH}) = 0,792 \text{ g/cm}^3$ gefüllt. Wie groß ist die Bruttomasse des Fasses?
- Die Schüttdichte von Kristallsoda $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10 \text{ H}_2\text{O}$ beträgt $\rho(\text{Soda}) = 0,55 \text{ g/cm}^3$.
 - a) Wie viele 25-kg-Säcke werden zum Absacken von 2,5 m³ Soda benötigt?
 - b) Wie groß ist die Bruttomasse einer Lieferung, wenn zum Palettieren zwei Paletten mit einer Masse von je 25 kg und Säcke mit einer Tara von 250 g verwendet werden?
- Welches Volumen füllen 300 kg Raschig-Ringe mit der Schüttdichte $\rho_{\text{Schütt}} = 0,550 \text{ g/cm}^3$ in einer Füllkörperkolonne aus (**Bild 2**)?
- Eine Charge von 2500 kg Chlorkautschuklack mit der Dichte $\rho_{\text{RUC}} = 1,28 \text{ g/cm}^3$ sollen in Dosen mit einem Einfüllvolumen von 750 mL abgefüllt werden. Wie viele Gebinde sind dafür erforderlich?



Bild 1: Rollreifenfass
(Aufgabe 4)

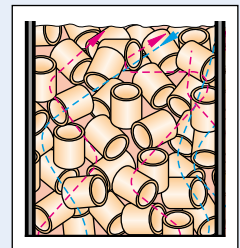


Bild 2: Raschig-Ringe-Schüttung (Aufgabe 6)

4.6.2 Berechnung der Molekülformel einer Verbindung

Um aus der empirischen Formel (dem kleinstmöglichen Stoffmengenverhältnis der beteiligten Atomarten) die Molekül- bzw. Teilchenformel zu berechnen, muss die **molare Masse** der untersuchten Substanz experimentell bestimmt werden.

Für Gase und leicht verdampfbare Flüssigkeiten kann die Bestimmung nach dem Prinzip von Avogadro entweder mit der Gasmaus oder mit einer Apparatur nach Victor Meyer durchgeführt werden (Seite 124).

Für feste Stoffe können Methoden herangezogen werden, welche auf der Erhöhung des Siedepunktes (Kryoskopie) oder der Senkung des Erstarrungspunktes (Ebullioskopie) eines reinen Lösemittels nach Lösen einer bestimmten Stoffportion der Probesubstanz beruhen (Seite 294).

Die Ermittlung der Molekülformel wird im Folgenden an konkreten Beispielen erläutert:

Beispiel 1: Bei der Verbindung in Beispiel 1 von Seite 117 wurde experimentell eine molare Masse von $M(\text{exp}) = 16,04 \text{ g/mol}$ bestimmt. Die empirische Formel lautete CH_4 . Welche Molekülformel hat die Verbindung?

Lösung: Aus der empirischen Formel kann die molare Masse $M(\text{ber.})$ der Verbindung berechnet werden:

$$M(\text{ber.}) = 1 \cdot M(\text{C}) + 4 \cdot M(\text{H}) = 12,011 \text{ g/mol} + 4 \cdot 1,008 \text{ g/mol} = 16,04 \text{ g/mol}$$

Den **Erweiterungsfaktor** F berechnet man nach: $F = \frac{M(\text{exp})}{M(\text{ber.})}$. Man erhält: $F = \frac{16,04 \text{ g/mol}}{16,04 \text{ g/mol}} = 1$

⇒ Die Molekülformel der Verbindung lautet: **CH_4**

Beispiel 2: Bei einer Verbindung wurde eine molare Masse von $M(\text{exp}) = 172,3 \text{ g/mol}$ bestimmt. Die empirische Formel wurde zu $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$ ermittelt. Welche Molekülformel hat die Verbindung?

Lösung: Aus der empirischen Formel kann die molare Masse $M(\text{ber.})$ der Verbindung berechnet werden:

$$M(\text{ber.}) = 5 \cdot M(\text{C}) + 10 \cdot M(\text{H}) + 1 \cdot M(\text{O}) = 5 \cdot 12,011 \text{ g/mol} + 10 \cdot 1,008 \text{ g/mol} + 15,999 \text{ g/mol} = 86,134 \text{ g/mol}$$

Den Erweiterungsfaktor berechnet man nach: $F = \frac{M(\text{exp})}{M(\text{ber.})} = \frac{172,3 \text{ g/mol}}{86,134 \text{ g/mol}} = 2,0004 \approx 2$

Die empirische Formel $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$ muss mit dem Faktor 2 erweitert werden.

Die Molekülformel lautet $2 \cdot (\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}) \Rightarrow \text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}_2$

Bei bekannten Massenanteilen der Elemente und der molaren Masse der unbekannten Verbindung kann das Stoffmengenverhältnis in der Molekülformel auch ohne den Umweg über die empirische Formel berechnet werden.

Beispiel: Durch Analyse einer Verbindung wurden die Massenanteile $w(\text{Na}) = 19,31 \%$, $w(\text{S}) = 26,93 \%$ und $w(\text{O}) = 53,76 \%$ ermittelt. Die Bestimmung der molaren Masse der Verbindung ergab $M(\text{Verb}) = 238,1 \text{ g/mol}$.

Welche Molekülformel hat die Verbindung?

Lösung: Molare Massen $M(\text{Na}) = 22,99 \text{ g/mol}$, $M(\text{S}) = 32,07 \text{ g/mol}$, $M(\text{O}) = 16,00 \text{ g/mol}$.

mit $w(\text{Na}) = 0,1931$, $w(\text{S}) = 0,2693$ und $w(\text{O}) = 0,5376$ ergibt sich die Anzahl der Elemente in der Verbindung:

$$\left. \begin{aligned} a(\text{Na}) &= \frac{w(\text{Na}) \cdot M(\text{Verb})}{M(\text{Na})} = \frac{0,1931 \cdot 238,1 \text{ g/mol}}{22,99 \text{ g/mol}} = 1,999 \approx 2 \\ a(\text{S}) &= \frac{w(\text{S}) \cdot M(\text{Verb})}{M(\text{S})} = \frac{0,2693 \cdot 238,1 \text{ g/mol}}{32,07 \text{ g/mol}} = 1,999 \approx 2 \\ a(\text{O}) &= \frac{w(\text{O}) \cdot M(\text{Verb})}{M(\text{O})} = \frac{0,5376 \cdot 238,1 \text{ g/mol}}{16,00 \text{ g/mol}} = 8,000 = 8 \end{aligned} \right\} \text{ Die Molekülformel lautet: } \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$$

Aufgaben zu 4.6.2 Berechnung der Molekül- bzw. Teilchenformel

- Welche Molekül- bzw. Teilchenformeln haben die Verbindungen mit folgender Zusammensetzung:
 - $w(\text{Ca}) = 38,70 \%$, $w(\text{P}) = 20,00 \%$ und $w(\text{O}) = 41,30 \%$ $M = 310,2 \text{ g/mol}$
 - $w(\text{C}) = 39,99 \%$, $w(\text{H}) = 6,72 \%$ und $w(\text{O}) = 53,30 \%$ $M = 60,02 \text{ g/mol}$
- Die Elementaranalyse einer organischen Verbindung ergab aus $132,50 \text{ mg}$ Probesubstanz $85,15 \text{ mg}$ Kohlenstoff (C) und $9,53 \text{ mg}$ Wasserstoff (H). Sauerstoff wurde nur qualitativ nachgewiesen. Die molare Masse wurde zu $M(\text{exp}) = 112,1 \text{ g/mol}$ bestimmt.
 - Welche empirische Formel hat die Verbindung?
 - Wie lautet die Molekülformel?

4.6.3 Ermittlung der Molekülformel mit der Elementaranalyse

Die **Elementaranalyse** (organic analysis) ist eine quantitative Bestimmung der Elemente in einer organischen Verbindung.

Aus der Analyse werden die Massen und daraus die Massenanteile der Elemente ermittelt.

Organische Verbindungen aus den Elementen Kohlenstoff C, Wasserstoff H und Sauerstoff O werden im Laborversuch in einem Verbrennungsrohr durch Kupfer(II)-oxid CuO oxidiert (**Bild 1**).

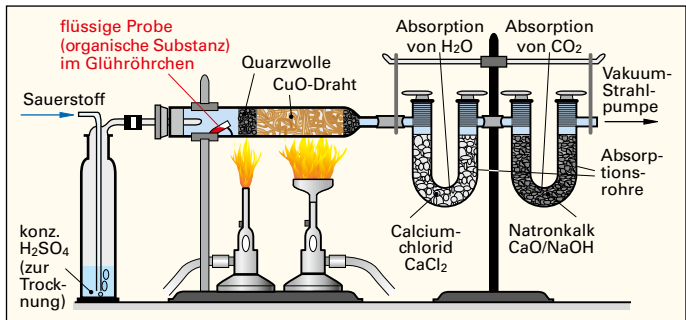


Bild 1: Elementaranalyse einer organischen Flüssigkeit

Aus dem Kohlenstoff C in der Verbindung entsteht Kohlenstoffdioxid CO₂ und aus dem Wasserstoff H entsteht Wasser H₂O.

Das Kohlenstoffdioxid wird an Natronkalk in einem U-Rohr gebunden. Der kondensierte Wasserdampf wird von Magnesiumperchlorat oder Calciumchlorid absorbiert.

Die Bestimmung der Massen an CO₂ und H₂O erfolgt durch Differenzwägung der Absorptionsröhre.

Daraus können mit den nebenstehenden Formeln die Massen an Kohlenstoff und Wasserstoff berechnet werden.

Die Masse an Sauerstoff erhält man aus der Differenz der Probenmasse sowie der Kohlenstoff- und Wasserstoffmasse.

Daraus berechnet man die Stoffmengen nach $n(X) = m(X) / M(X)$.

Das Verhältnis der einzelnen Stoffmengen in der Verbindung erhält man durch Division mit der kleinsten Stoffmenge.

Daraus wird die empirische Formel bestimmt. Mit dem Erweiterungsfaktor (Seite 118) erhält man die Molekülformel.

**Masse an Kohlenstoff
aus dem absorbierten CO₂**

$$m(C) = \frac{M(C) \cdot m(\text{CO}_2)}{M(\text{CO}_2)}$$

**Masse an Wasserstoff
aus dem absorbierten H₂O**

$$m(H) = \frac{2 \cdot M(H) \cdot m(\text{H}_2\text{O})}{M(\text{H}_2\text{O})}$$

**Masse an Sauerstoff durch
Massendifferenzberechnung**

$$m(O) = m(\text{Probe}) - [m(C) + m(H)]$$

Beispiel: In einer organischen Verbindung wurden die Elemente C, H und O nachgewiesen. Die molare Masse der Probe wurde zu 46,13 g/mol bestimmt. Die Elementaranalyse ergab folgende Wägeergebnisse.

Einwaage an Probesubstanz: 3,403 g

Einwaage Natronkalk-Absorptionsrohr: 44,372 g

Auswaage Natronkalk-Absorptionsrohr: 50,884 g

Einwaage CaCl₂-Absorptionsrohr: 56,278 g

Auswaage CaCl₂-Absorptionsrohr: 60,274 g

Lösung: $m(\text{CO}_2) = 50,884 \text{ g} - 44,372 \text{ g} = 6,512 \text{ g}$

$m(\text{H}_2\text{O}) = 60,274 \text{ g} - 56,278 \text{ g} = 3,996 \text{ g}$

$$m(C) = \frac{M(C) \cdot m(\text{CO}_2)}{M(\text{CO}_2)} = \frac{12,011 \text{ g/mol} \cdot 6,512 \text{ g}}{44,010 \text{ g/mol}} = 1,777 \text{ g}$$

$$\Rightarrow n(C) = \frac{1,777 \text{ g}}{12,011 \text{ g/mol}} = 0,1479 \text{ mol}$$

$$m(H) = \frac{2 \cdot M(H) \cdot m(\text{H}_2\text{O})}{M(\text{H}_2\text{O})} = \frac{2 \cdot 1,008 \text{ g/mol} \cdot 3,996 \text{ g}}{18,015 \text{ g/mol}} = 0,4472 \text{ g}$$

$$\Rightarrow n(H) = \frac{0,4472 \text{ g}}{1,008 \text{ g/mol}} = 0,4437 \text{ mol}$$

$$m(O) = m(\text{Probe}) - [m(C) + m(H)] = 3,403 \text{ g} - [1,777 \text{ g} + 0,4472 \text{ g}] \approx 1,179 \text{ g}$$

$$\Rightarrow n(O) = \frac{1,179 \text{ g}}{16,00 \text{ g/mol}} = 0,0737 \text{ mol}$$

Berechnung der Stoffmengenverhältnisse

$$C : \frac{n(C)}{n(O)} = \frac{0,1479 \text{ mol}}{0,0737 \text{ mol}} = 2,007 \approx 2$$

$$H : \frac{n(H)}{n(O)} = \frac{0,4437 \text{ mol}}{0,0737 \text{ mol}} = 6,020 \approx 6$$

$$O : \frac{n(O)}{n(O)} = \frac{0,0737 \text{ mol}}{0,0737 \text{ mol}} = 1$$

⇒ **Empirische Formel:** C₂H₆O

Ermittlung des Erweiterungsfaktors: $F = \frac{M(\text{exp})}{M(\text{ber})}$

$$M(\text{ber}) = (2 \cdot 12,011 + 6 \cdot 1,008 + 16,00) \text{ g/mol} = 46,07 \text{ g/mol}$$

$$F = \frac{46,13 \text{ g/mol}}{46,07 \text{ g/mol}} \approx 1$$

⇒ Die **Molekülformel** ist identisch mit der empirischen Formel und lautet ebenfalls **C₂H₆O**

4.9 Umsatzberechnung bei chemischen Reaktionen

4.9.1 Umsatzberechnung bei Einsatz reiner Stoffe

Die in einer Reaktionsgleichung verwendeten Symbole und Formeln haben neben einer qualitativen auch eine quantitative Bedeutung.

Beispiel 1: Aus der Reaktionsgleichung zur Synthese des Wassers aus den Elementen

2	H₂	+	O₂	→	2	H₂O
lassen sich folgende Aussagen ableiten:						
	Wasserstoff	und	Sauerstoff	reagieren zu		Wasser
2 Moleküle	Wasserstoff	und	1 Molekül	Sauerstoff	reagieren zu	2 Molekülen Wasser
2 Mol	Wasserstoff	und	1 Mol	Sauerstoff	reagieren zu	2 Mol Wasser
2 Liter	Wasserstoff	und	1 Liter	Sauerstoff	reagieren zu	2 Liter Wasserdampf
4 Gramm	Wasserstoff	und	32 Gramm	Sauerstoff	reagieren zu	36 Gramm Wasser

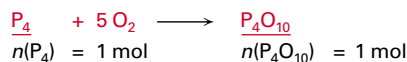
Die letzte Aussage ist auch als Gesetz von der Erhaltung der Masse bekannt (Seite 108). Es ist die Basis zur Berechnung des Stoffumsatzes (turnover).

Zunächst wird bei der Umsatzberechnung davon ausgegangen, dass die Reaktion mit vollständig reinen Stoffen durchgeführt wird sowie vollständig (quantitativ) und ohne Nebenreaktionen abläuft.

Die Umsatzberechnung erfolgt mit einer **Dreisatz-Schlussrechnung**.

Beispiel 2: Welche Masse an Phosphor(V)-oxid P₄O₁₀ entsteht bei der Verbrennung von 20,0 g weißem Phosphor?

Lösung: 1. Aufstellen der Reaktionsgleichung, gegebene und gesuchte Größen unterstreichen:



2. Umgesetzte Stoffmengen:

$$n(\text{P}_4) = 1 \text{ mol} \quad n(\text{P}_4\text{O}_{10}) = 1 \text{ mol}$$

3. Heraussuchen der molaren Massen:

$$M(\text{P}_4) = 123,90 \text{ g/mol}, \quad M(\text{P}_4\text{O}_{10}) = 283,89 \text{ g/mol}$$

4. Berechnung der umgesetzten Massen durch Schlussrechnung:

$$123,90 \text{ g P}_4 \text{ reagieren zu } 283,89 \text{ g P}_4\text{O}_{10}$$

$$20,0 \text{ g P}_4 \text{ reagieren zu } x \text{ P}_4\text{O}_{10} \quad \Rightarrow \quad x = m(\text{P}_4\text{O}_{10}) = \frac{20,0 \text{ g} \cdot 283,89 \text{ g}}{123,90 \text{ g}} \approx \mathbf{45,8 \text{ g}}$$

Die Stoffumsätze bei chemischen Reaktionen lassen sich auch mit einer **Größengleichung** berechnen. Sie wird nachfolgend abgeleitet. Dazu erinnert man sich folgender Erkenntnisse:

- Das Verhältnis der Reaktionskoeffizienten ν der entsprechenden Stoffe in der Reaktionsgleichung ist gleich dem Verhältnis der umgesetzten Stoffmengen n : $\nu_1/\nu_2 = n_1/n_2$.
- Ferner sind die Massenverhältnisse zweier sich zu einer Verbindung vereinigenden Stoffe konstant: $m(X_1)/m(X_2) = \text{konst.}$ (Gesetz der konstanten Proportionen, Seite 108).

Mit der Grundgleichung für stöchiometrische Berechnungen von Seite 112 $m(X) = n(X) \cdot M(X)$ folgt die nebenstehende Gleichung für den Stoffumsatz.

Stoffumsatzgleichung

$$\frac{m(X_1)}{n(X_1) \cdot M(X_1)} = \frac{m(X_2)}{n(X_2) \cdot M(X_2)}$$

Mit der **Stoffumsatzgleichung** lässt sich z.B. die Masse $m(X_1)$ des Stoffes X_1 bei gegebener Masse $m(X_2)$ des Stoffes X_2 berechnen, wenn die molaren Massen $M(X_1)$ und $M(X_2)$ der Stoffe X_1 und X_2 bekannt sind. Das Stoffmengenverhältnis $n(X_1)/n(X_2)$ lässt sich direkt aus der Reaktionsgleichung ablesen. Es entspricht dem Verhältnis der Reaktionskoeffizienten.

Beispiel 3: Ermittlung des Stoffumsatzes der Reaktion von Beispiel 2 mit der Stoffumsatzgleichung.

Lösung:
$$\frac{m(\text{P}_4)}{n(\text{P}_4) \cdot M(\text{P}_4)} = \frac{m(\text{P}_4\text{O}_{10})}{n(\text{P}_4\text{O}_{10}) \cdot M(\text{P}_4\text{O}_{10})}$$

$$\Rightarrow m(\text{P}_4\text{O}_{10}) = \frac{m(\text{P}_4) \cdot n(\text{P}_4\text{O}_{10}) \cdot M(\text{P}_4\text{O}_{10})}{n(\text{P}_4) \cdot M(\text{P}_4)} = \frac{20,0 \text{ g} \cdot 1 \text{ mol} \cdot 283,89 \text{ g/mol}}{1 \text{ mol} \cdot 123,90 \text{ g/mol}} = 45,82567 \text{ g} \approx \mathbf{45,8 \text{ g}}$$

Aufgaben zur Umsatzberechnung bei Einsatz reiner Stoffe

1. Eisenpulver reagiert mit Schwefelblüte beim Erhitzen unter Bildung von Eisensulfid.



Welche Masse an Eisensulfid kann aus 5,0 g Eisenpulver hergestellt werden?

2. Quecksilberoxid zerfällt beim Erwärmen in Quecksilber und Sauerstoff: $2 \text{HgO} \longrightarrow 2 \text{Hg} + \text{O}_2$

Wie viel Gramm Quecksilber entstehen bei der thermischen Zersetzung von 1,25 g Quecksilberoxid?

3. Welche Masse an Kupfer kann durch Reduktion von 1,376 g Kupfer(II)-oxid mit Wasserstoff nach der Reaktionsgleichung $\text{CuO} + \text{H}_2 \longrightarrow \text{Cu} + \text{H}_2\text{O}$ gewonnen werden?

4. Wie viel Tonnen Schwefelwasserstoff müssen verbrannt werden, um 100 t Schwefel herzustellen?



5. Beim Solvay-Verfahren zur Soda-Herstellung wird Natriumhydrogencarbonat bei 200° C zu Soda Na_2CO_3 calciniert: $2 \text{NaHCO}_3 \longrightarrow \text{Na}_2\text{CO}_3 + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$

Welche Masse an Soda Na_2CO_3 entsteht beim Calcinieren von 1000 kg Natriumhydrogencarbonat?

6. Gebrannter Kalk CaO wird mit Wasser angerührt (gelöscht): $\text{CaO} + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{Ca(OH)}_2$

Wie viel Kilogramm Löschkalk Ca(OH)_2 entstehen aus 25 kg gebranntem Kalk?

7. Eine Ammoniak-Syntheseanlage produziert nach der Reaktionsgleichung $\text{N}_2 + 3 \text{H}_2 \longrightarrow 2 \text{NH}_3$ pro Stunde 60 t Ammoniak NH_3 .

Wie viel Tonnen Stickstoff und Wasserstoff werden dazu benötigt?

8. Bei der Reaktion von Natriumchlorid und Schwefelsäure entsteht Natriumsulfat (Glaubersalz): $2 \text{NaCl} + \text{H}_2\text{SO}_4 \longrightarrow \text{Na}_2\text{SO}_4 + 2 \text{HCl}$

Welche Masse an Glaubersalz Na_2SO_4 entsteht bei der Reaktion von 150 kg Natriumchlorid mit Schwefelsäure?

9. Phosphor(V)-oxidchlorid wird in der chemischen Technik durch Oxidation von Phosphortrichlorid mit reinem Sauerstoff in praktisch quantitativer Ausbeute hergestellt: $2 \text{PCl}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 2 \text{POCl}_3$

Welche Masse an Phosphortrichlorid wird täglich umgesetzt, wenn 40 t Phosphoroxidchlorid pro Tag zu produzieren sind?

10. Aluminium wird durch Schmelzflusselektrolyse von Aluminiumoxid hergestellt:



Wie groß ist der Elektrodenverbrauch pro Kilogramm Aluminium?

11. Kesselstein CaCO_3 bildet sich, wenn Calciumhydrogen-haltiges Wasser erhitzt wird: Die Reaktionsgleichung lautet: $\text{Ca(HCO}_3)_2 \longrightarrow \text{CaCO}_3 + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$

Wie viel Gramm Kesselstein CaCO_3 entstehen, wenn 1000 L Wasser mit einer temporären Härte von $c(\text{Ca(HCO}_3)_2) = 2,3 \text{ mmol/L}$ zum Sieden erhitzt wird?

12. Anilin $\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$ wird durch katalytische Gasphasenhydrierung von Nitrobenzol $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$ in praktisch quantitativer Ausbeute hergestellt: $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2 + 3 \text{H}_2 \longrightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$

Wie viel Kubikmeter Nitrobenzol mit der Dichte $\rho = 1,20 \text{ g/cm}^3$ müssen umgesetzt werden, wenn pro Stunde 15,0 t Anilin produziert werden sollen?

13. Welche Masse an Benzolsulfonsäure entsteht bei der Sulfonierung von 100 t Benzol mit Oleum?



14. Von 12,00 g Aluminium werden 25% mit Brom zu Aluminiumbromid oxidiert.



5.1.1 Massenanteil w

Der **Massenanteil $w(X)$** (mass fraction) einer Komponente X ist der Quotient aus der Masse $m(X)$ dieser Komponente und der Masse der Lösung $m(\text{Lsg})$.

Die Masse der Lösung $m(\text{Lsg})$ ist die Summe aus der Masse des Lösemittels $m(\text{Lm})$ und der Masse des gelösten Stoffes $m(X)$.

Der Massenanteil $w(X)$ wird meistens als Dezimalzahl oder in Prozent angegeben. Insbesondere für kleine und kleinste Massenanteile gibt es die in **Tabelle 1** genannten Angabemöglichkeiten.

Darüber hinaus besteht die Möglichkeit, den Massenanteil mit gleichen oder ungleichen Einheitenzeichen für die Zähler- und Nennergröße anzugeben (vgl. Tabelle 1, unten).

Massenanteil

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

$$\text{mit } m(\text{Lsg}) = m(\text{Lm}) + m(X)$$

Beispiel 1: Eine Natronlauge wird aus einer Elektrolysezelle mit dem Massenanteil $w(\text{NaOH}) = 0,351$ abgezogen.

Wie groß ist der Massenanteil in Prozent? Was bedeutet diese Angabe?

Lösung: $w(\text{NaOH}) = 0,351 = 0,351 \cdot 100\% = \mathbf{35,1\%}$

Die Angabe bedeutet: In 100 g Natronlauge sind 35,1 g Natriumhydroxid NaOH gelöst.

Beispiel 2: In 2000 kg Wasser werden 500 kg NaCl gelöst (**Bild 1**). Welchen Massenanteil $w(\text{NaCl})$ hat die entstehende Natriumchlorid-Lösung?

Lösung: $m(\text{Lsg}) = m(\text{Lm}) + m(\text{NaCl})$
 $m(\text{Lsg}) = 2000 \text{ kg} + 500 \text{ kg} = 2500 \text{ kg}$

$$w(\text{NaCl}) = \frac{m(\text{NaCl})}{m(\text{Lsg})} = \frac{500 \text{ kg}}{2500 \text{ kg}}$$

$$= 0,2000 \approx \mathbf{20,0\%}$$

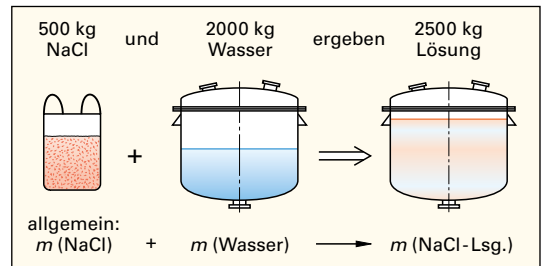


Bild 1: Größen zur Bestimmung des Massenanteils w einer Lösung

Insbesondere für kleine und kleinste Massenanteile gibt es spezielle Angabemöglichkeiten (**Tabelle**).

Tabelle: Angabemöglichkeiten für Massenanteile					
in % Prozent $\Rightarrow$ Teile pro 100 Teile	in ‰ Promille $\Rightarrow$ Teile pro 10^3 Teile	in ppm parts per million $\Rightarrow$ Teile pro 10^6 Teile	in ppb* parts per billion $\Rightarrow$ Teile pro 10^9 Teile	in ppt** parts per trillion $\Rightarrow$ Teile pro 10^{12} Teile	in ppq*** parts per quadrillion $\Rightarrow$ Teile pro 10^{15} Teile
Beispiel: Der Massenanteil $w(\text{Zucker})$ in Wasser ($1 \text{ L} \hat{=} 1 \text{ kg}$) beträgt nach Lösen eines Zuckerwürfels ($m = 2,7 \text{ g}$) in:					
0,27 L $\hat{=}$ 2 Tassen	2,7 L $\hat{=}$ 2,7 Flaschen	2700 L $\hat{=}$ Tankwagen	2,7 Mio. L $\hat{=}$ eine Tankerladung	2,7 Milliarden L $\hat{=}$ Stauseefüllung	2,7 Billionen L $\hat{=}$ Starnberger See
$w = 1\%$ $= 1 \text{ g}/100 \text{ g}$	$w = 1\text{‰}$ $= 1 \text{ g}/1000 \text{ g}$ $= 1 \text{ g}/1 \text{ kg}$	$w = 1 \text{ ppm}$ $= 1 \text{ mg}/1 \text{ kg}$ $= 1 \text{ g}/1000 \text{ kg}$	$w = 1 \text{ ppb}$ $= 1 \text{ µg}/1 \text{ kg}$ $= 1 \text{ mg}/1000 \text{ kg}$	$w = 1 \text{ ppt}$ $= 1 \text{ ng}/1 \text{ kg}$ $= 1 \text{ µg}/1000 \text{ kg}$	$w = 1 \text{ ppq}$ $= 1 \text{ pg}/1 \text{ kg}$ $= 1 \text{ µg}/1000 \text{ t}$

* parts per billion ppb: b steht für billion, die amerikanische Bezeichnung für Milliarde.

** parts per trillion ppt: t steht für trillion, die amerikanische Bezeichnung für Billion.

*** parts per quadrillion: q steht für quadrillion, die amerikanische Bezeichnung für Billiarde.

Enthält der zu lösende Stoff gebundenes Wasser, so muss dieses Kristallwasser bei der Berechnung der zu lösenden Stoffportion herausgerechnet werden.

Beispiel 3: Wie viel Eisensulfat-Heptahydrat $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ muss eingewogen werden, wenn 750 g Eisensulfat-Lösung mit einem Massenanteil $w(\text{FeSO}_4) = 12,5 \%$ angesetzt werden sollen?

Lösung mit Schlussrechnung:

$$M(\text{FeSO}_4) = 151,91 \text{ g/mol}, M(\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}) = 278,02 \text{ g/mol}$$

Berechnung der in der Lösung enthaltenen Masse an Eisensulfat FeSO_4 :

In 100 g Lösung sind 12,5 g Eisensulfat enthalten

In 705 g Lösung sind x Eisensulfat enthalten

$$\Rightarrow x = m(\text{FeSO}_4) = \frac{12,5 \text{ g} \cdot 750 \text{ g}}{100 \text{ g}} = 93,75 \text{ g}$$

Berechnung der einzuwiegenden Masse an Eisensulfat-Heptahydrat mit den molaren Massen:

151,91 g FeSO_4 sind in 278,02 g $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ enthalten

93,75 g FeSO_4 sind in y $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ enthalten

$$\Rightarrow y = m(\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}) = \frac{93,75 \text{ g} \cdot 278,02 \text{ g}}{151,91 \text{ g}} \approx 172 \text{ g}$$

Lösung mit Größengleichung:

$$w(\text{FeSO}_4) = \frac{m(\text{FeSO}_4)}{m(\text{Lsg})} \Rightarrow m(\text{FeSO}_4) = w(\text{FeSO}_4) \cdot m(\text{Lsg}) = 0,125 \cdot 750 \text{ g} = 93,75 \text{ g}$$

$$m(\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}) = \frac{m(\text{FeSO}_4) \cdot M(\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O})}{M(\text{FeSO}_4)} = \frac{93,75 \text{ g} \cdot 278,02 \text{ g/mol}}{151,91 \text{ g/mol}} = 171,58 \text{ g} \approx 172 \text{ g}$$

Aufgaben zum Massenanteil w

- In 250 kg Salzsäure sind 80,5 kg Hydrogenchlorid HCl gelöst. Wie groß ist der Massenanteil der Salzsäure?
- In 550 kg Wasser werden 200 kg Natriumsulfat Na_2SO_4 gelöst. Welchen Massenanteil $w(\text{Na}_2\text{SO}_4)$ hat die Lösung in Prozent?
- Aus 30 g Kaliumhydroxid soll eine Kalilauge mit dem Massenanteil $w(\text{KOH}) = 4,1 \%$ angesetzt werden. Welche Masse an Lösung wird erhalten?
- Welche Massen an Wasser und an Natriumchlorid werden zur Herstellung von 2,30 t einer NaCl -Sole mit dem Massenanteil $w(\text{NaCl}) = 26,1 \%$ zur Elektrolyse in Membranzellen benötigt?
- Für einen Reaktor soll aus 550 kg Calciumchlorid und Wasser eine Calciumchlorid-Lösung, Massenanteil $w(\text{CaCl}_2) = 30 \%$, hergestellt werden. Welche Masse an Lösung wird erhalten?
- Eine Ammoniak-Lösung der Dichte $\rho = 0,940 \text{ kg/dm}^3$ enthält in 250 L Lösung 34,97 kg Ammoniak. Welchen Massenanteil $w(\text{NH}_3)$ hat die Lösung?
- Welche Masse an Salpetersäure HNO_3 ist in 370 mL Salpetersäure-Lösung der Dichte $1,0427 \text{ g/cm}^3$ mit dem Massenanteil $w(\text{HNO}_3) = 8,0 \%$ enthalten?
- Aus 250 g technischem Natriumsulfat mit $w(\text{Na}_2\text{SO}_4) = 97,6 \%$ soll mit Wasser eine Lösung mit $w(\text{Na}_2\text{SO}_4) = 2,50 \%$ hergestellt werden. Welche Masse an Wasser ist vorzulegen?
- 5,5 kg Calciumchlorid-Hexahydrat $\text{CaCl}_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$ werden in 80 kg Wasser gelöst. Berechnen Sie den Massenanteil $w(\text{CaCl}_2)$ in der Lösung.
- In 250 kg Eisensulfat-Lösung sind 550 g Eisensulfat-Heptahydrat mit einem Massenanteil von $w(\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}) = 98,9 \%$ gelöst. Wie groß ist der Massenanteil $w(\text{FeSO}_4)$ der Lösung?
- Wie viel Soda (Natriumcarbonat-Decahydrat) $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$ ist einzuwiegen, wenn 50,0 kg Soda-Lösung mit einem Massenanteil $w(\text{Na}_2\text{CO}_3) = 2,50 \%$ entstehen sollen?
- Die NaCl -Sole zur Elektrolyse in Membranzellen darf maximal 2,0 ppb Calcium-Ionen enthalten. Welche Masse an Calcium-Ionen Ca^{2+} dürfen 2,50 t einer aufbereiteten Sole maximal enthalten?

7 Analytische Bestimmungen

Das Ziel **quantitativer Analysen** (quantitative analysis) ist die Ermittlung der Mengen an Bestandteilen in einer Substanz. Dies können Elemente, Ionen, Verbindungen, Radikale oder funktionelle Gruppen sein.

Die Bestimmungen werden vor allem durchgeführt zur Auswahl und Überwachung industrieller Rohstoffe sowie zur Beurteilung der Qualität von Zwischenprodukten, Fertigerzeugnissen und Abfallstoffen.

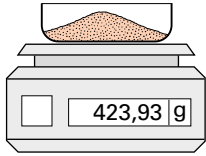
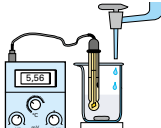
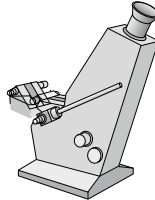
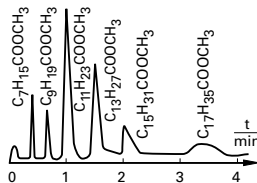
Ferner dienen sie zur Kontrolle von Luftverunreinigungen, von Abwasser, von Arbeitsplatz-Grenzwerten in Arbeitsräumen sowie zur Untersuchung von Böden, Lebensmitteln und Trinkwasser auf unzulässigerweise eingesetzte Chemikalien.

Ein weiteres breites Anwendungsgebiet sind biochemische und medizinische Untersuchungen in der Diagnostik und Forschung.

■ Übersicht analytischer Bestimmungsmethoden

Die Art, Beschaffenheit und Menge des zu untersuchenden Stoffes bestimmen in erster Linie die Wahl der Analysenmethode. Dabei kommen chemische, biochemische, physikalisch-chemische oder rein physikalische Methoden zum Einsatz.

Die folgende Übersicht zeigt die nachfolgend behandelten analytischen Verfahren.

Übersicht: Analytische Bestimmungsmethoden			
Analytische Methode	Zugrundeliegendes physikalisches Phänomen		Name der analytischen Verfahren
Gravimetrie	Thermogravimetrie: Bestimmung der Masse- änderung durch Wägung nach Wärmebehandlung		Thermogravimetrische Bestimmungen: Feuchtigkeitsgehaltsbestimmung Trockengehaltsbestimmung Glührückstandsbestimmung Bestimmung des Wassergehalts in Mineralölen
Volumetrie/ Maßanalyse	Bestimmung des Äquivalenzpunktes über die Farbänderung von Indikatoren durch Titration		Neutralisationstitation Redoxittitation Komplexbildungstitation
Maßanalysen mit elektrochemischen Methoden	Messung der – Potenzialänderung oder – Leitfähigkeits- änderung in leitfähigen Lösungen		Potentiometrie Konduktometrie
Optische Analyse- methoden	Brechung von Licht Drehung der Schwin- gungsebene des Lichts Absorption von Lichtstrahlen		Refraktometrie Polarimetrie Fotometrie UV/VIS-Spektroskopie
Chromatografische Analysemethoden	Verteilungs- gleichgewichte und Adsorptions- gleichgewichte an aktiven Oberflächen		Papierchromatografie PC Dünnschichtchromatografie DC Säulenchromatografie SC Gaschromatografie GC Hochdruck-Flüssigkeits- chromatografie HPLC

7.1 Thermogravimetrische Analysen

Quantitative Untersuchungsergebnisse vieler Stoffe sind nur vergleichbar, wenn sie auf die Trockensubstanz bezogen werden. Man erhält somit Werte, die vom Feuchtigkeitsgehalt einer Analysenprobe unabhängig sind. Dies ist besonders bei schwankenden Feuchtigkeitsgehalten während der Lagerung, z.B. in einem Freilager, von Bedeutung.

Die Trockensubstanz lässt sich mithilfe thermogravimetrischer Analysen (TGA) bestimmen.

Mit der Thermogravimetrie (TG) werden temperatur- und zeitabhängige Massenänderungen einer Probe erfasst. Dabei wird zuerst die Masse der Ausgangsstoffe und nach einer thermischen Behandlung die Masse der untersuchten Stoffportion durch wiegen bestimmt. Anschließend berechnet man den Gehalt der Stoffe.

Im Folgenden werden die genannten Einzelverfahren näher vorgestellt:

- **Feuchtigkeitsgehaltsbestimmungen** (moisture content determination) und **Trockengehaltsbestimmungen** (dry solids content determination)
- **Glührückstandsbestimmungen** (ignition residue determination)
- **Bestimmung des Wassergehalts in Mineralölen** (Determination of water content in mineral oils)

7.1.1 Feuchtigkeits- und Trockengehaltsbestimmungen von Feststoffen

Bestandteil vieler chemisch-technischer Untersuchungen von Rohstoffen und Produkten ist die Prüfung von Substanzen auf ihren Feuchtigkeitsgehalt und ihren Trockengehalt.

Bei der Bestimmung des Feuchtigkeits- und Trockengehalts von Feststoff-Analysenproben wird zunächst die feuchte Probe eingewogen. Die Feuchtigkeit der Stoffportion lässt sich anschließend im Trockenschrank bei 105 °C durch Trocknen bis zur Massenkonstanz entfernen (**Bild 1**).

Aus der Differenz der Masse an feuchter Probe $m_{\text{hyg}}^{1)}$ und trockener Probe $m_{\text{xer}}^{1)}$ wird die Masse an Feuchtigkeit $m(\text{H}_2\text{O})$ der Probe erhalten: $m(\text{H}_2\text{O}) = m_{\text{hyg}} - m_{\text{xer}}$

Der **Feuchtigkeitsgehalt** $w(\text{H}_2\text{O})$ einer Probe ist der Quotient aus der Masse an Wasser in der Probe $m(\text{H}_2\text{O})$ und der feuchten Probenmasse $m_{\text{hyg}}(\text{Probe})$.

Der **Trockengehalt** w_{xer} einer Probe ist der Quotient aus der Masse an trockener Probe m_{xer} und der Masse an feuchter Probe $m_{\text{hyg}}(\text{Probe})$.

Der Feuchtigkeitsgehalt $w(\text{H}_2\text{O})$ und der Trockengehalt w_{xer} sind Massenanteile. Bei ein und derselben Probe addieren sie sich zu 1 bzw. 100 %. $w(\text{H}_2\text{O}) + w_{\text{xer}} = 100 \%$.

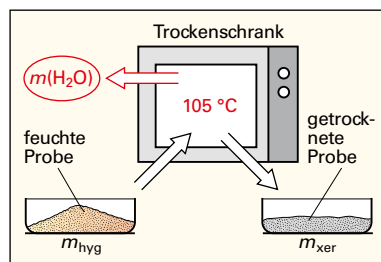


Bild 1: Feuchtigkeitsgehalts- und Trockengehaltsbestimmung

Feuchtigkeitsgehalt

$$w(\text{H}_2\text{O}) = \frac{m(\text{H}_2\text{O})}{m_{\text{hyg}}(\text{Probe})}$$

Trockengehalt

$$w_{\text{xer}} = \frac{m_{\text{xer}}}{m_{\text{hyg}}(\text{Probe})}$$

Beispiel: 10,842 g Koksprobe werden bei 105 °C im Trockenschrank bis zur Massenkonstanz getrocknet. Für die getrocknete Koksprobe wird eine Wägedifferenz von 0,682 g ermittelt. Wie groß ist der Feuchtigkeits- und Trockengehalt des Kokes?

- Lösung:**
1. Berechnung des Feuchtigkeitsgehalts: $w(\text{H}_2\text{O}) = \frac{m(\text{H}_2\text{O})}{m_{\text{hyg}}(\text{Koks})} = \frac{0,682 \text{ g}}{10,842 \text{ g}} = 0,06301 \approx \mathbf{6,30 \%}$
 2. Berechnung des Trockengehalts: $w_{\text{xer}} = \frac{m_{\text{xer}}}{m_{\text{hyg}}(\text{Koks})} = \frac{10,842 \text{ g} - 0,682 \text{ g}}{10,842 \text{ g}} = 0,93699 \approx \mathbf{93,70 \%}$
 3. Prüfung auf 100 %: $w(\text{H}_2\text{O}) + w_{\text{xer}} = 6,30 \% + 93,70 \% = 100 \%$

¹⁾ **hyg**, Abkürzung für feucht, hygroscopisch; **xer**, Abkürzung für xeros, trocken

Aufgaben zu Feuchtigkeits- und Trockengehaltsbestimmungen von Feststoffen

- 8,374 g Zinkoxidpaste (ZnO) werden bei 105°C bis zur Massenkonstanz getrocknet. Die Auswaage beträgt 1,523 g. Wie groß ist der Massenanteil an Trockensubstanz in der Paste?
- Eine Kohleprobe hat einen Massenanteil an Feuchtigkeit von 7,35 %. 8,254 g Kohle werden bei 105°C bis zur Massenkonstanz getrocknet. Wie viel trockener Rückstand verbleibt?
- 5,4563 g eines temperaturempfindlichen feuchten Pigments werden im Exsikkator über Calciumchlorid getrocknet (**Bild 1**). Wie groß ist der Massenanteil an Feuchtigkeit in der Probe, wenn nach dem Trocknen 5,4123 g Trockensubstanz ausgewogen werden?
- Zur Bestimmung der flüchtigen Anteile des Pigments Zirkondioxid (ZrO_2) werden 4,308 g bei 250°C bis zur Massenkonstanz erhitzt. Nach dem Abkühlen verbleibt ein Rückstand von 2,835 g. Wie groß ist der Massenanteil $w(\text{flüchtige Anteile})$ des Pigments?
- 10,4561 g Farbstoffteig ergeben beim Trocknen 1,7542 g Rückstand. Welcher Massenanteil an Trockensubstanz liegt vor?
- Welchen Massenanteil $w(\text{MnO}_2)$, bezogen auf die Trockensubstanz, hat Braunstein, dessen Analyse folgende Massenanteile ergab: $w(\text{H}_2\text{O}) = 0,33\%$, $w(\text{MnO}_2) = 54,72\%$?
- Bei der Bestimmung des Feuchtigkeitsgehalts einer Paste wurden folgende Massen ermittelt:
Masse des Trockenbleches: 2,15 kg | Masse Trockenblech mit Feuchtgut: 9,95 kg
Masse Trockenblech mit Trockengut: 7,12 kg
Welchen Feuchtigkeitsgehalt hat die untersuchte Probe?

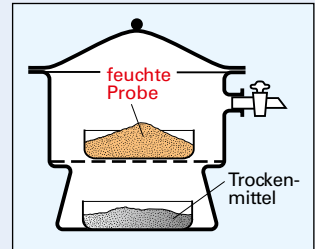


Bild 1: Trocknen im Exsikkator
(Aufgabe 3)

7.1.2 Glührückstandsbestimmungen

Bei der Glührückstandsbestimmung wird die in einem Porzellantiegel eingewogene Analysenprobe in einem Muffelofen bei Temperaturen zwischen 600°C und 1100°C gegläht (**Bild 2**).

Die Probesubstanz zerfällt beim Glühen in einen Glührückstand w_{rsd} ¹⁾ und einen Glühverlust w_v . Sowohl der Glührückstand w_{rsd} als auch der Glühverlust w_v sind Massenanteile.

Bei anorganischen Verbindungen z.B. besteht der Glührückstand w_{rsd} aus Metalloxiden. Der Glühverlust w_v setzt sich bei organischen Stoffen aus Kohlenstoffdioxid, Wasser und anderen niedermolekularen Verbindungen zusammen.

Der Masseverlust beim Glühen m_v ist die Differenz aus der Masse der Probe $m(\text{Probe})$ vor dem Glühen und dem Rückstand m_{rsd} nach dem Glühen: $m_v = m(\text{Probe}) - m_{\text{rsd}}$

Der **Glührückstand** w_{rsd} ist das Verhältnis der Masse des Rückstands nach dem Glühen m_{rsd} zur Masse der Ausgangsprobe $m(\text{Probe})$.

Der **Glühverlust** w_v ist das Verhältnis des Masseverlustes nach dem Glühen m_v zur Masse der Ausgangsprobe.

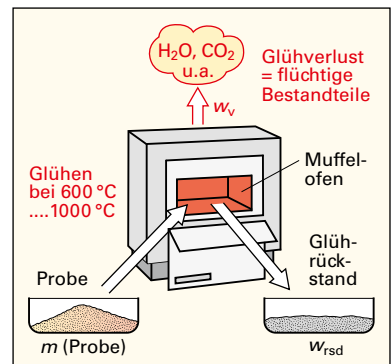


Bild 2: Glührückstandsbestimmung

Glührückstand

$$w_{\text{rsd}} = \frac{m_{\text{rsd}}}{m(\text{Probe})}$$

Glühverlust

$$w_v = \frac{m_v}{m(\text{Probe})}$$

Beispiel 1: Beim Glühen von 0,2500 g Kalkstein wird ein Rückstand von 0,1708 g erhalten. Wie groß ist der Glührückstand in Prozent?

Lösung: $w_{\text{rsd}} = \frac{m_{\text{rsd}}}{m(\text{Probe})} = \frac{0,1708 \text{ g}}{0,2500 \text{ g}} = 0,683200 \approx 68,32\%$

¹⁾ **rsd**, Abkürzung für residuus, Rest

7.3 Bestimmung von Abwasserkennwerten

Die Belastung natürlicher Gewässer erfolgt durch häusliche, industrielle und landwirtschaftliche Abwässer (**Bild 1**). Häusliche Abwässer enthalten im Wesentlichen organische Stoffe, die durch Mikroorganismen unter Verbrauch von Sauerstoff (aerob) weitgehend abbaubar sind.

Abwässer aus Gewerbe, Industrie und Landwirtschaft enthalten zusätzlich Verschmutzungen und Schadstoffe, die teilweise nicht oder nur in beschränktem Umfang durch Mikroorganismen abbaubar sind.

Zudem enthalten sie häufig toxische Stoffe, die das biologische Leben in einem Gewässer schädigen oder sogar vernichten können.

Wichtige Parameter zur Beurteilung des Verschmutzungsgrads eines Abwassers oder Gewässers sind der **biochemische Sauerstoffbedarf BSB** und der **chemische Sauerstoffbedarf CSB**.



Bild 1: Einleitung von verschmutztem Abwasser in einen Fluss

7.3.1 Biochemischer Sauerstoffbedarf BSB

Der biochemische Sauerstoffbedarf ist eine Kennzahl zur Beschreibung der Verschmutzung eines Wassers mit organischen Stoffen.

Biochemische Grundlagen: Befinden sich organische Stoffe im Wasser, so werden sie bei Vorhandensein geeigneter Mikroorganismen in deren Körpersubstanz aufgenommen, d.h. abgebaut (**Bild 2**).

Dabei wird Sauerstoff (O_2) verbraucht, man nennt es einen *aeroben Abbau*. Der Sauerstoff wird aus dem Wasser entnommen, in dem er gelöst vorliegt. Bei der Reaktion entstehen weitere Mikroorganismen und Kohlenstoffdioxid (CO_2). Die Mikroorganismen vermehren sich so lange, bis alle organischen Stoffe im Wasser abgebaut sind. Dieser Vorgang läuft auch in einer Kläranlage ab.

Der beim Abbau der organischen Verunreinigung verbrauchte, aus dem Wasser entnommene Sauerstoff steht den anderen Lebewesen im Wasser nicht mehr zur Verfügung. Das kann zum biologischen Absterben bzw. zum „Umkippen“ eines Gewässers führen.

Der Verbrauch an Sauerstoff zum Abbau der organischen Stoffe im Wasser dient als Kennzahl.

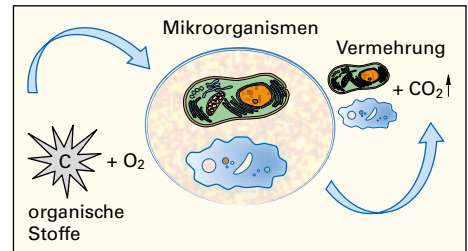


Bild 2: Vorgänge beim Abbau organischer Schadstoffe im Abwasser

Der biochemische Sauerstoffbedarf **BSB_n** ist definiert als Massenkonzentration $\beta(O_2)$ an gelöstem Sauerstoff im Abwasser (in mg/L), die unter festgelegten Bedingungen durch die biochemische Oxidation von organischen und anorganischen Stoffen verbraucht wird.

Der Index n ist die Anzahl der Tage der Reaktionszeit (Inkubationszeit)

Die englische Bezeichnung lautet: biochemical oxygen demand after n days BOD_n.

Die biologisch abbaubaren Substanzen im Wasser sind nach 5 Tagen zu etwa zu 70% von Mikroorganismen abgebaut; ein annähernd vollständiger aerober Abbau dauert rund 20 Tage. Man ermittelt den BSB_n meist nach 5 oder 7 Tagen und bezeichnet ihn als BSB₅ bzw. BSB₇.

Der BSB-Wert ist ein Summenparameter, d.h., er beschreibt nicht den Sauerstoffverbrauch von einzelnen Stoffen, sondern den Verbrauch sämtlicher, durch Mikroorganismen oxidierbaren Stoffe.

Der biochemische Sauerstoffbedarf **BSB_n** wird als Parameter genutzt:

- zur Kennzeichnung der Belastung von Abwässern mit organischen Verunreinigungen
- zur Beschreibung der Gewässergüte von natürlichen Gewässern bezüglich organischer Inhaltsstoffe.

Verschmutztes Abwasser hat einen hohen BSB_n-Wert, z.B. 524 mg/L; ein wenig belastetes natürliches Gewässer hat einen niedrigen BSB_n-Wert, z.B. 42 mg/L.

Zur Bestimmung des biochemischen Sauerstoffbedarfs BSB_n gibt es mehrere Verfahren.

■ BSBn – Bestimmung nach Winkler

Zur Bestimmung des BSBn nach Winkler wird die Probe eines Abwassers um den Faktor 2 verdünnt. Dann werden drei Probeflaschen nach Winkler mit F_1 , F_2 und F_3 gekennzeichnet. Die Flaschen F_2 und F_3 werden luftblasenfrei randvoll mit der verdünnten Wasserprobe gefüllt; Flasche F_1 wird nahezu randvoll gefüllt. Die Flaschen F_2 und F_3 werden sofort mit einem unten abgeschrägten Glasstopfen verschlossen und bei 20°C im Dunkeln 5 Tage (Inkubationszeit) aufbewahrt.

Probe 1 wird mit 0,5 mL Mangan(II)-sulfat-Lösung und 0,5 mL Kaliumiodid-haltiger Natronlauge versetzt. Nach Aufsetzen des unten abgeschrägten Stopfens wird luftfrei verschlossen und kräftig geschüttelt. Nach Absetzen des Niederschlags lässt man aus einer in die Flasche eingetauchten Pipette 0,5 mL konz. Schwefelsäure einfließen und schüttelt nach dem Verschließen kräftig durch.

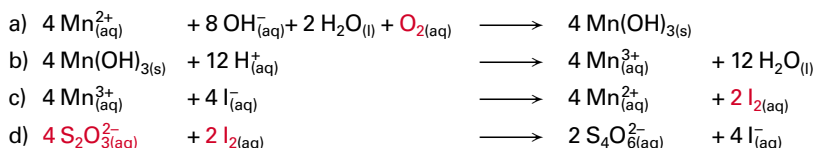
Von der Probe F_1 werden 25,0 mL abpipettiert und nach Zugabe von 3 Tropfen Stärkelösung bis zum Verschwinden der blauen Farbe Natriumthiosulfat-Maßlösung titriert. Man erhält den Thiosulfat-Verbrauch $V_1(\text{ML})$. ML = Maßlösung.

Nach 5 Tagen Inkubationszeit werden die Proben 2 und 3 in gleicher Weise behandelt und titriert. Man erhält die Thiosulfat-Verbräuche $V_2(\text{ML})$ und $V_3(\text{ML})$. Die Thiosulfat-Verbräuche $V_1(\text{ML})$, $V_2(\text{ML})$ und $V_3(\text{ML})$ dienen zur Berechnung des verbrauchten Sauerstoffs $\beta(\text{O}_2)$ und damit des BSBn-Wertes (siehe unten).

Bei der **Sauerstoffbestimmung nach Winkler** oxidiert im Wasser gelöster Sauerstoff mit den zugefügten Mn^{2+} -Ionen in basischer Lösung zu Mangan(III)-hydroxid (a). Beim Ansäuern entstehen freie Mn^{3+} -Ionen (b), die bei Zugabe von überschüssigem Kaliumiodid eine äquivalente Menge an Iod freisetzen (c). Das ausgeschiedene Iod wird durch Titration mit Natriumthiosulfat-Maßlösung quantitativ bestimmt (d).

Die Reaktion dieser iodometrischen Titration verläuft als Redox-Reaktion, d.h., durch Elektronenaustausch der reagierenden Stoffe. Bei der Titrationsreaktion (d) wird das Iod I_2 durch die Thiosulfat-Ionen $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ zu Iodid-Ionen I^- reduziert.

Folgende Einzelreaktionen laufen bei der Sauerstoffbestimmung nach Winkler ab:



Die Stoffmengenbilanz lautet: $4 \text{ mol S}_2\text{O}_3^{2-} \Leftrightarrow 2 \text{ mol I}_2 \Leftrightarrow 1 \text{ mol O}_2 \Rightarrow 1 \text{ mol S}_2\text{O}_3^{2-} \Leftrightarrow 0,25 \text{ mol O}_2$

Aus den Verbrauchswerten an Thiosulfat-Maßlösung $V_1(\text{ML})$ unmittelbar nach Probenahme sowie $V_2(\text{ML})$ und $V_3(\text{ML})$ nach 5 Tagen bei 20°C lässt sich der BSB₅-Wert ($\hat{=}\beta(\text{O}_2)$) nach nebenstehender Größengleichung berechnen.

Diese Gleichung ergibt sich aus der Grundgleichung maßanalytischer Bestimmungen (Seite 211), f_a = Verdünnungsfaktor.

Für eine Thiosulfat-Maßlösung mit $c(\text{S}_2\text{O}_3^{2-}) = 10,0 \text{ mmol/L}$ vereinfacht sich mit $M(\text{O}_2) = 32,00 \text{ g/mol}$ und $z^*(\text{O}_2) = 4$ die Größengleichung wie folgt:

Biochemischer Sauerstoffbedarf nach Winkler

$$\text{BSB}_5 = \beta(\text{O}_2) = \frac{M(\text{O}_2) \cdot c(\text{S}_2\text{O}_3^{2-}) \cdot \Delta V(\text{S}_2\text{O}_3^{2-}) \cdot f_a}{z^*(\text{O}_2) \cdot V(\text{Probe})}$$

$$\text{Mit } \Delta V(\text{S}_2\text{O}_3^{2-}) = \Delta V(\text{ML}) = V_1(\text{ML}) - \frac{V_2(\text{ML}) + V_3(\text{ML})}{2}$$

$$\text{BSB}_5 = \beta(\text{O}_2) = \frac{80,00 \text{ mg} \cdot \Delta V(\text{S}_2\text{O}_3^{2-}) \cdot f_a}{L \cdot V(\text{Probe})}$$

Beispiel: Eine BSBn-Bestimmung nach Winkler eines biologisch geklärten Abwassers ergibt bei der Titration mit Natriumthiosulfat-Maßlösung zur Sauerstoffbestimmung folgende Werte:

$V_1(\text{ML}) = 10,55 \text{ mL}$ Natriumthiosulfat-Maßlösung, $c(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3) = 0,01 \text{ mol/L} = 10,0 \text{ mmol/L}$,
 $V_2(\text{ML}) = 8,55 \text{ mL}$; $V_3(\text{ML}) = 8,75 \text{ mL}$ Thiosulfat-Maßlösung.

Wie groß ist der BSB₅ des Abwassers?

$$\Delta V(\text{S}_2\text{O}_3^{2-}) = V_1(\text{ML}) - ((V_2(\text{ML}) + V_3(\text{ML})) / 2) = 10,55 \text{ mL} - (8,55 \text{ mL} + 8,75 \text{ mL}) / 2 = 1,75 \text{ mL}$$

Lösung: $\text{BSB}_5 = \beta(\text{O}_2) = \frac{80,00 \text{ mg} \cdot \Delta V(\text{S}_2\text{O}_3^{2-}) \cdot f_a}{L \cdot V(\text{Probe})} = \frac{80,00 \text{ mg} \cdot 1,75 \text{ mL} \cdot 2}{L \cdot 25,0 \text{ mL}} = 11,2 \text{ mg/L}$

■ BSBn-Bestimmung nach DIN EN 1899-2 bzw. DIN EN ISO 5815

Für **schwach verschmutzte Abwässer** mit einem BSBn von 0,5 mg/L bis 6,0 mg/L wird die BSBn-Bestimmung mit unverdünntem Abwasser durchgeführt.

Das Schema der Bestimmung zeigt **Bild 1**. Die Abwasserprobe wird auf 20°C thermostatiert und die Sauerstoff-Massenkonzentration $\beta_1(\text{O}_2)$ gemessen. Die Messung erfolgt meist mit einer Sauerstoffsonde gemäß DIN EN 25813. Die Probe wird mit einer kleinen Menge an Mikroorganismen (Kläranlagen-Ablauf) geimpft.

Nach Einfüllen und luftdichtem Verschließen der Reaktionsflasche wird sie für 5 Tage (Inkubationszeit) in einen Thermostat mit 20°C gestellt. In dieser Zeit reagieren die Mikroorganismen mit den organischen Stoffen in der Abwasserprobe. Anschließend wird die Sauerstoff-Konzentration $\beta_2(\text{O}_2)$ bestimmt.

Die **Berechnung** des biochemischen Sauerstoffbedarfs BSBn erfolgt als Differenz der gemessenen Sauerstoff-Massenkonzentrationen $\beta_1(\text{O}_2)$ vor und $\beta_2(\text{O}_2)$ nach der Reaktion.

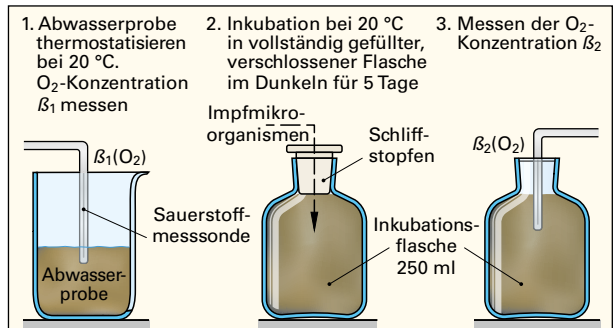


Bild 1: Schema der BSBn-Bestimmung nach DIN EN 1899-2

Biochemischer Sauerstoffbedarf

$$\text{BSB}_n = \beta_1(\text{O}_2) - \beta_2(\text{O}_2)$$

Beispiel: Bei einer BSBn-Bestimmung nach DIN EN 1899-2 werden in der Abwasserprobe die O_2 -Massenkonzentration $\beta_1(\text{O}_2) = 8,7 \text{ mg/L}$ und nach der Reaktion $\beta_2(\text{O}_2) = 3,9 \text{ mg/L}$ gemessen. Welchen BSBn-Wert hat die Abwasserprobe?

Lösung: $\text{BSBn} = \beta_1(\text{O}_2) - \beta_2(\text{O}_2) = 8,7 \text{ mg/L} - 3,9 \text{ mg/L} = 3,8 \text{ mg/L}$

Für **stark verschmutzte Abwässer** mit einem BSBn-Wert von 3 mg/L bis 6000 mg/L wird eine BSBn-Bestimmung mit Verdünnung der Abwasserprobe durchgeführt. Der Ablauf der Bestimmung ist ähnlich wie in Bild 1 gezeigt, wobei die Abwasserprobe mit an Sauerstoff angereichertem Verdünnungswasser verdünnt und mit Impfmikroorganismen (Kläranlagen-Ablauf) sowie Allylthioharnstoff (als Nitrifikationshemmer) versetzt wird. Die Durchführung ist in DIN EN 1890-1 festgelegt. Die Berechnung des BSBn-Werts erfolgt mit nebenstehender Gleichung. Es sind:

β_1, β_2 O_2 -Massenkonzentration in der Probe
 β_3, β_4 O_2 -Massenkonzentration im Verdünnungswasser
 V_{Pr} Volumen der Abwasserprobe
 V_{t} Gesamtvolumen = $V_{\text{Pr}} + \text{Verd.wasser}$

Biochemischer Sauerstoffbedarf mit Verdünnung

$$\text{BSB}_n = [(\beta_1 - \beta_2) - \frac{V_{\text{t}} - V_{\text{Pr}}}{V_{\text{t}}} \cdot (\beta_3 - \beta_4)] \cdot \frac{V_{\text{t}}}{V_{\text{Pr}}}$$

■ Respirometrische BSBn-Bestimmung nach DIN EN 10707

Die respirometrische BSBn-Bestimmung in der Flasche wird überwiegend in der Abwasseranalytik in Kläranlagen eingesetzt. Der BSBn-Wert wird dabei indirekt über eine Unterdruckmessung ermittelt.

Die Messung wird in einer Braunglasflasche mit Druckmesskopf und CO_2 -Absorber durchgeführt (**Bild 2**). Zur BSBn-Bestimmung wird die Messflasche (ca. 500 ml) zur Hälfte bis 2/3 mit dem zu bestimmenden Abwasser gefüllt. Nach Zugabe von Impfmikroorganismen und Nitrifikationshemmer wird ein Magnetrührstäbchen zugegeben und die Flasche mit dem schraubbaren Druckmesskopf luftdicht verschlossen. Dann wird die Flasche auf einer Magnetrührerplatte für 5 Tage zur Reaktion im Thermostat (20°C) gerührt.

In der Flasche reagieren die Mikroorganismen und verbrauchen dabei Sauerstoff (siehe Bild 2, Seite 215). Aus 1 mol Sauerstoff O_2 wird 1 mol Kohlenstoffdioxid CO_2 . Sie nehmen dasselbe Volumen

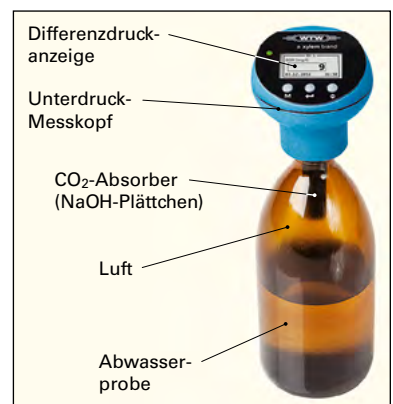


Bild 2: Braunglasflasche mit Druckmesskopf zur BSBn-Bestimmung