

2 Stöchiometrie

2.1 Einführung

Die Leistung der Stöchiometrie liegt darin, dass sie für jedes chemisch reagierende System *Beziehungen zwischen den Stoffmengenänderungen der reagierenden Verbindungen* liefert. Beispielsweise kann die Reaktionsgleichung $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 = 2\text{NH}_3$ durch die Aussage „wenn 1 mol N_2 verbraucht wird, dann werden 3 mol H_2 verbraucht und 2 mol NH_3 gebildet“ dargestellt werden. Die Grundlage der Relationen zwischen den Stoffmengenänderungen ist die *Erhaltung der chemischen Elemente*, die stets erfüllt sein muss. Daher gelten die stöchiometrischen Beziehungen zu jedem Zeitpunkt und an jeder Raumstelle, sie sind unabhängig von den jeweiligen Reaktionsbedingungen (wie z. B. Temperatur, Druck, Zusammensetzung) und von der Art und der Betriebsweise des Reaktors, in dem die Reaktionen stattfinden. Hierin begründet sich ihre besondere Bedeutung und darüber hinaus die Möglichkeit, Stöchiometrie ohne weitere Information zur Reaktionsführung anzuwenden.

2.2 Allgemeine Reaktionsgleichungen

Die in einem beliebigen Reaktionssystem vorhandenen Stoffe werden begrifflich unterschieden: als *Komponenten* bezeichnet man alle vorhandenen chemischen Substanzen. Komponenten lassen sich unterteilen in die *Reaktanden* - die Reaktionsteilnehmer - und die *Begleitstoffe*, also Komponenten, die nicht an der Reaktion teilnehmen, wie Lösemittel, Inertstoffe, Katalysatoren usw., deren Anwesenheit aber durch die Prozessführung bedingt ist. Die Reaktanden werden schließlich entweder als *Edukte* (Ausgangsstoffe) oder als *Produkte* einer Reaktion klassifiziert.

Beispiel. Das beim Rösten sulfidischer Erze mit Luft entstehende Röstgas wird an einem Katalysator oxidiert, um das für die Herstellung von Schwefelsäure benötigte Schwefeltrioxid zu gewinnen. Von den vier vorhandenen *Komponenten* SO_2 , O_2 , SO_3 , N_2 sind die ersten drei *Reaktanden* (wegen $\text{SO}_2 + 0,5\text{O}_2 = \text{SO}_3$), während N_2 als *Begleitstoff* (Inertstoff) nicht an der Reaktion teilnimmt. Aus den beiden *Edukten* SO_2 und O_2 entsteht das einzige *Produkt* SO_3 .

Anhand des Beispiels $\text{SO}_2 + 0,5\text{O}_2 = \text{SO}_3$ ist zum einen ersichtlich, dass Reaktionsgleichungen nur die Summenformeln der Reaktanden, nicht jedoch die Summenformeln der gegebenenfalls vorhandenen Begleitstoffe (z. B. N_2) enthalten. Zum anderen treten Zahlenwerte auf, die man als *stöchiometrische Koeffizienten* bezeichnet, wobei der Wert 1 nicht explizit geschrieben wird.

An die allgemeine Form einer Reaktionsgleichung stellt man zwei Forderungen, deren Zweckmäßigkeit in den folgenden Abschnitten zu ersehen sein wird: einerseits sollen *alle Komponenten* in ihr auftreten, andererseits will man durch geeignete Wahl der Vorzeichen der stöchiometrischen Koeffizienten berücksichtigen, dass die Edukte verbraucht, die Produkte gebildet und die Begleitstoffe nicht umgesetzt werden.

Angenommen, es seien insgesamt N Komponenten in einem beliebigen Reaktionssystem vorhanden. Werden diese Komponenten nunmehr (in wie immer auch gewählter Reihenfolge) mit dem *Komponentenindex* $i = 1, 2, \dots, N$ durchnummeriert, so kann man anstelle der Summenformel der Komponente i das Symbol A_i in Reaktionsgleichungen benutzen. Der stöchiometrische Koeffizient der Komponente A_i wird mit ν_i bezeichnet. Sein Zahlenwert ist gleich dem in der wie üblich geschriebenen Reaktionsgleichung, jedoch wird sein Vorzeichen festgelegt gemäß

$$\begin{aligned} \nu_i < 0, & \text{ falls } A_i \text{ ein Edukt ist;} \\ \nu_i > 0, & \text{ falls } A_i \text{ ein Produkt ist;} \\ \nu_i = 0, & \text{ falls } A_i \text{ ein Inertstoff ist.} \end{aligned} \quad (2.1)$$

Damit lautet *die allgemeine Form einer chemischen Reaktionsgleichung*¹

$$\nu_1 A_1 + \nu_2 A_2 + \dots + \nu_N A_N = 0 \quad \text{bzw.} \quad \sum_{i=1}^N \nu_i A_i = 0. \quad (2.2)$$

Beispiel. Anstelle der Summenformeln der $N = 4$ Komponenten SO_2 , O_2 , SO_3 , N_2 kann man die Symbole A_1 , A_2 , A_3 , A_4 benutzen, wenn die Nummerierung in der angegebenen Reihenfolge geschieht. Erweitert man die Reaktionsgleichung $\text{SO}_2 + 0,5\text{O}_2 = \text{SO}_3$ um die Inertkomponente N_2 und schreibt die Edukte auf die rechte Seite (Reaktionsgleichungen lassen sich wie mathematische Gleichungen manipulieren), so entsteht $(-1)\text{SO}_2 + (-0,5)\text{O}_2 + (+1)\text{SO}_3 + (0)\text{N}_2 = 0$. Mit den eingeführten Symbolen entspricht dies $\nu_1 A_1 + \nu_2 A_2 + \nu_3 A_3 + \nu_4 A_4 = 0$. Die stöchiometrischen Koeffizienten der Edukte SO_2 bzw. O_2 betragen $\nu_1 = -1$ bzw. $\nu_2 = -0,5$ (sind also < 0 , wie gefordert), während für das Produkt SO_3 $\nu_3 = +1$ (also > 0) gilt und für den Inertstoff N_2 schließlich $\nu_4 = 0$ wird.

¹ Statt (2.2 rechts) wird im Folgenden oft die Kurzschreibweise $\sum \nu_i A_i = 0$ benutzt.

2.3 Schlüsselreaktionen

Problemstellung. Am Ausgang eines Reaktors liegen neben den nicht umgesetzten Edukten die je nach den Reaktionsbedingungen entstandenen Produkte vor. In der Regel begnügt man sich nicht damit, die auftretenden Komponenten nur aufzulisten, wie dies in Abb. 2.1 schematisch gezeigt ist. Vielmehr will man stöchiometrische Reaktionsgleichungen erstellen, die den Verbrauch der Edukte und die Bildung der Produkte wiedergeben. Dies führt auf die Frage, wieviele Reaktionsgleichungen sich für ein beliebiges Reaktionssystem formulieren lassen, das aus den $i = 1, \dots, N$ Komponenten A_i mit bekannten Summenformeln besteht.

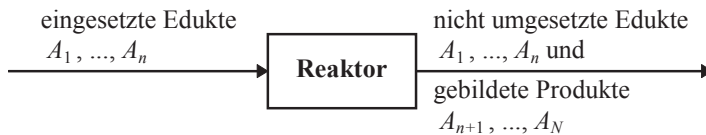
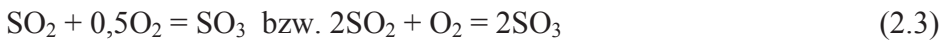


Abb. 2.1 Komponenten am Eingang und Ausgang eines Reaktors.

Linear abhängige Reaktionsgleichungen. Reaktionsgleichungen lassen sich wie mathematische Gleichungen behandeln. Wie man beispielsweise aus



ersieht, verändert die Multiplikation mit einem Faktor zwar die Werte der stöchiometrischen Koeffizienten, doch bleiben die Verhältnisse der Stoffmengenänderungen gleich. Eine der beiden Reaktionsgleichungen ist als Vielfaches der anderen „überflüssig“. Dies wird durch folgende Aussage dargestellt: *eine Reaktionsgleichung wird als linear abhängig bezeichnet, wenn sie aus einer anderen durch Multiplikation mit einem Faktor hervorgeht.*

Linear unabhängige Reaktionsgleichungen. Die beiden Reaktionsgleichungen



sind offensichtlich nicht linear abhängig (denn eine geht nicht aus der anderen durch Multiplikation mit einem Faktor hervor), sondern - wie man in diesem Fall sagt - *linear unabhängig*. Die lineare Unabhängigkeit zweier Reaktionsgleichungen erkennt man daran, dass bestimmte Komponenten nur in einer einzigen Gleichung auftreten, wie etwa CO_2 in (2.4) oder CH_4 in (2.5).

Linearkombinationen von Reaktionsgleichungen. Sind mehrere linear unabhängige Reaktionsgleichungen vorgegeben, so kann man jede mit einem beliebigen Faktor multiplizieren und schließlich alle Gleichungen addieren. Die so entstehende „neue“ Reaktionsgleichung bezeichnet man als eine *Linearkombination* der vorgegebenen Gleichungen, da sie von ihnen linear abhängig ist. In Tab. 2.1 ist diese Vorgehensweise beispielhaft dargestellt.

Tab. 2.1 Beispiele für die Bildung von Linearkombinationen aus den linear unabhängigen Reaktionsgleichungen (2.4) und (2.5).

Faktor _(2.4)	Faktor _(2.5)	Linear abhängige Gleichung = Faktor _(2.4) *(2.4) + Faktor _(2.5) *(2.5)	
1	-1	$\text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + 4\text{H}_2$	(2.6)
3	1	$4\text{CO} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{CH}_4 + 3\text{CO}_2$	(2.7)
1	1	$2\text{CO} + 2\text{H}_2 = \text{CO}_2 + \text{CH}_4$	(2.8)
...	...	...	

Die eingangs gestellte Frage kann nunmehr zumindest teilweise beantwortet werden: *für ein Reaktionssystem aus N Komponenten lassen sich beliebig viele Reaktionsgleichungen angeben, wenn man linear unabhängige Reaktionsgleichungen kennt.* Daher ist die Fragestellung zu modifizieren: wieviele und welche linear unabhängigen Reaktionsgleichungen lassen sich formulieren, wenn die $i = 1, \dots, N$ Summenformeln A_i der beteiligten Komponenten bekannt sind?

Mit den Gleichungen (2.4) und (2.5) wurden bereits zwei linear unabhängige Reaktionsgleichungen für das Reaktionssystem CO , H_2O , CO_2 , H_2 , CH_4 angegeben. Gefragt ist, ob weitere linear unabhängige Gleichungen existieren und wenn ja, welche.

Schlüsselreaktionen. Linear abhängige Reaktionen (z. B. (2.6) - (2.8)) enthalten aus stöchiometrischer Sicht nicht mehr Information als die linear unabhängigen Gleichungen (z. B. (2.4), (2.5)). Einen vollständigen Satz linear unabhängiger Reaktionsgleichungen nennt man deshalb *Schlüsselreaktionen*. *Die Anzahl der Schlüsselreaktionen gibt die minimale Anzahl von Reaktionsgleichungen an, die man aus stöchiometrischen Gründen benötigt.* Von Interesse ist daher, wie man in einer systematischen Vorgehensweise Schlüsselreaktionen aus den bekannten Summenformeln bestimmen kann.

Ermittlung der Schlüsselreaktionen aus Summenformeln. Eine allgemeine formale Behandlung erfordert einen gewissen Aufwand an linearer Algebra [1, 2]. Um dies zu umgehen, wird im Folgenden ein systematisches Verfahren zur Be-

stimmung von Schlüsselreaktionen vorgestellt und anhand der Rechenbeispiele 2.1 und 2.2 illustriert. Die Vorgehensweise verläuft in drei Schritten:

- *Schritt 1: Reaktionsgleichung nach (2.2) mit unbekannten stöchiometrischen Koeffizienten für die Komponenten formulieren und Elementbilanzen erstellen.*

Elementbilanzen. Um zu prüfen, ob eine Reaktionsgleichung „stöchiometrisch richtig“ ist, werden die Bilanzen aller in den Komponenten vorhandenen chemischen Elemente erstellt. Am Beispiel der (partiell falschen) Reaktionsgleichung $5\text{SO}_2 + 7\text{O}_2 = 5\text{SO}_3$ findet man für das Element S: $(5 \cdot 1 \text{ S im gebildeten SO}_3) - (5 \cdot 1 \text{ S im verbrauchten SO}_2) - (7 \cdot 0 \text{ S im verbrauchten O}_2) = 0$; die Schwefel-Bilanz ist erfüllt. Für das zweite Element O errechnet man: $(5 \cdot 3 \text{ O im gebildeten SO}_3) - (5 \cdot 2 \text{ O im verbrauchten SO}_2) - (7 \cdot 2 \text{ O im verbrauchten O}_2) = -9$. Die O-Bilanz ist nicht erfüllt; die Reaktionsgleichung ist hinsichtlich des Elements Sauerstoff inkorrekt. Für jedes chemische Element wird also die Summe aus (stöchiometrischer Koeffizient $\cdot$ Anzahl der Atome des Elements in der Komponente) gebildet, die für eine „stöchiometrisch richtige“ Reaktionsgleichung den Wert Null annimmt. Ist dies nicht der Fall, so liegt entweder ein Fehler in den Summenformeln vor oder einer der stöchiometrischen Koeffizienten ist falsch. Im Beispiel ist 2,5 anstelle der 7 für den stöchiometrischen Koeffizienten von O_2 zu setzen.

- *Schritt 2: Auflösung des Gleichungssystems.* In der Regel ist die Anzahl der Elementbilanzen N_e kleiner als die Anzahl N der stöchiometrischen Koeffizienten. Sofern alle Elementbilanzen linear unabhängig sind², kann man $M = N - N_e$ der Koeffizienten als sogenannte *freie Unbekannte* vorgeben. Aus den insgesamt N_e Elementbilanzen lassen sich dann die verbleibenden N_e stöchiometrischen Koeffizienten, die man als *gebundene Unbekannte* bezeichnet, in Abhängigkeit von den freien Unbekannten ermitteln.
- *Schritt 3: Setze das Ergebnis von Schritt 2 in die allgemeine Reaktionsgleichung von Schritt 1 ein und fasse alle Komponenten mit gleichen Faktoren zusammen.* Hierdurch werden alle gebundenen Unbekannten in der allgemeinen Reaktionsgleichung durch die freien Unbekannten ersetzt, die als Faktoren vor den Schlüsselreaktionen stehen, formal:

$$\nu_\alpha [\text{Schlüsselreaktion 1}] + \nu_\beta [\text{Schlüsselreaktion 2}] + \dots = 0.$$

Die nicht näher bestimmten „freien“ Faktoren $\nu_\alpha, \nu_\beta, \dots$ vor den Schlüsselreaktionen spiegeln wider, dass jede beliebige Reaktionsgleichung des betrachteten Systems als eine Linearkombination dieser linear unabhängigen Reaktionsgleichungen erzeugt werden kann, wie dies oben anhand von (2.6, 2.7, 2.8) in Tab. 2.1 demonstriert wurde.

² Im Rechenbeispiel 2.2 wird der Fall linear abhängiger Elementbilanzen betrachtet.

Rechenbeispiel 2.1 *Bestimmung von Schlüsselreaktionen über Summenformeln.*
Ein Satz von Schlüsselreaktionen ist für die $N = 5$ Komponenten CO , H_2O , CO_2 , H_2 , CH_4 anzugeben.

Lösung. Die in (2.2) angegebene allgemeine Form der Reaktionsgleichung ist nach Schritt 1 des Verfahrens für die betrachteten Komponenten zu formulieren,

$$\nu_1 \text{CO} + \nu_2 \text{H}_2\text{O} + \nu_3 \text{CO}_2 + \nu_4 \text{H}_2 + \nu_5 \text{CH}_4 = 0. \quad (2.9)$$

Die $N = 5$ unbekannten stöchiometrischen Koeffizienten sind so zu wählen, dass die Bilanzen der $N_e = 3$ chemischen Elemente C, H, O erfüllt werden,

$$\text{Elementbilanz C:} \quad \nu_1 + \nu_3 + \nu_5 = 0, \quad (2.10)$$

$$\text{Elementbilanz H:} \quad 2\nu_2 + 2\nu_4 + 4\nu_5 = 0, \quad (2.11)$$

$$\text{Elementbilanz O:} \quad \nu_1 + \nu_2 + 2\nu_3 = 0. \quad (2.12)$$

Um das System dieser $N_e = 3$ Gleichungen für die $N = 5$ Unbekannten entsprechend Schritt 2 zu lösen, müssen $M = 5 - 3 = 2$ der ν_i 's als freie Unbekannte vorgegeben werden, da weniger Gleichungen als Unbekannte vorliegen. Aus den drei Elementbilanzen lassen sich drei der ν_i 's als gebundene Unbekannte in Abhängigkeit von diesen freien Unbekannten bestimmen. Beispielsweise können hier ν_1 , ν_3 als freie Unbekannte benutzt werden, so dass folgt

	gebundene Unbekannte	ausgedrückt durch freie Unbekannte	
aus C-Bilanz (2.10):	$\nu_5 =$	$-\nu_1 - \nu_3,$	(2.13)

aus O-Bilanz (2.12):	$\nu_2 =$	$-\nu_1 - 2\nu_3,$	(2.14)
----------------------	-----------	--------------------	--------

aus H-Bilanz (2.11):	$\nu_4 =$	$-\nu_2 - 2\nu_5 = 3\nu_1 + 4\nu_3.$	(2.15)
----------------------	-----------	--------------------------------------	--------

(2.13) und (2.14) werden in (2.15 Mitte) eingesetzt, um (2.15 rechts) zu erhalten. Welche der Koeffizienten als freie oder als gebundene Unbekannte gewählt werden, ist (fast) freigestellt; die Auswahl wird man aber so treffen, dass sich die Auflösung der Gleichungen möglichst einfach gestaltet.

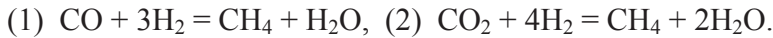
Gemäß Schritt 3 wird das Ergebnis von Schritt 2, also die Gleichungen (2.13, 2.14, 2.15), in (2.9) eingefügt mit dem Resultat

$$\nu_1 \text{CO} + (-\nu_1 - 2\nu_3) \text{H}_2\text{O} + \nu_3 \text{CO}_2 + (3\nu_1 + 4\nu_3) \text{H}_2 + (-\nu_1 - \nu_3) \text{CH}_4 = 0,$$

das nach gemeinsamen Faktoren geordnet wird,

$$\nu_1[\text{CO} - \text{H}_2\text{O} + 3\text{H}_2 - \text{CH}_4] + \nu_3[-2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 + 4\text{H}_2 - \text{CH}_4] = 0. \quad (2.16)$$

(2.16) besagt: *jede Reaktionsgleichung lässt sich als Linearkombination der $M = 2$ Schlüsselreaktionen darstellen.* Die gesuchten Schlüsselreaktionen stehen in (2.16) innerhalb der eckigen Klammern und lauten



Wählt man in Schritt 1 andere freie Unbekannte, so können durchaus andere Reaktionsgleichungen als Schlüsselreaktionen erhalten werden. Man sagt daher, dass man mit (2.16) *einen Satz von Schlüsselreaktionen* bestimmt. In jedem Fall gewinnt man aber dieselbe Anzahl linear unabhängiger Reaktionsgleichungen (vgl. hierzu Übungsaufgabe 2.1).

Rechenbeispiel 2.2 *Schlüsselreaktionen über Summenformeln.* Ein Satz von Schlüsselreaktionen ist für die $N = 4$ isomeren Komponenten o-, m-, p-Xylol und Ethylbenzol zu ermitteln, die alle die Summenformel C_8H_{10} besitzen.

Lösung. Mit den Abkürzungen „O“, „M“, „P“ für o-, m-, p-Xylol und „E“ für Ethylbenzol lautet die allgemeine Reaktionsgleichung

$$\nu_1\text{O} + \nu_2\text{M} + \nu_3\text{P} + \nu_4\text{E} = 0$$

und die Elementbilanzen

$$\text{Elementbilanz C: } 8\nu_1 + 8\nu_2 + 8\nu_3 + 8\nu_4 = 0,$$

$$\text{Elementbilanz H: } 10\nu_1 + 10\nu_2 + 10\nu_3 + 10\nu_4 = 0.$$

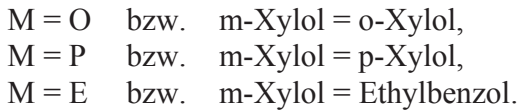
Die beiden Elementbilanzen sind linear abhängig (eine geht aus der anderen durch Multiplikation mit einem Faktor hervor), so dass nur *eine* Gleichung verwertet werden kann. Entsprechend Schritt 2 müssen somit insgesamt drei der ν_i 's als freie Unbekannte vorgegeben werden; beispielsweise kann man

$$\nu_2 = -\nu_1 - \nu_3 - \nu_4$$

wählen. Nach Schritt 3 resultiert

$$\nu_1\text{O} + (-\nu_1 - \nu_3 - \nu_4)\text{M} + \nu_3\text{P} + \nu_4\text{E} = 0;$$

nach Umordnen werden die drei Schlüsselreaktionen gewonnen,



Das Beispiel veranschaulicht, dass nicht immer $M = N - N_e$ Schlüsselreaktionen gefunden werden. Sind nicht alle Elementbilanzen zu verwenden, weil lineare Abhängigkeit zwischen einem Teil dieser Gleichungen vorliegt, so ist stattdessen

$$M = N - N_e + (\text{Anzahl der linear abhängigen Elementbilanzen})$$

zu setzen. Im Beispiel ergeben sich $M = 4 - 2 + 1 = 3$ Schlüsselreaktionen, da eine Elementbilanz linear abhängig ist. Diese Problematik wird z. B. in [1, 4] systematisch mittels linearer Algebra behandelt.

Übungsaufgabe 2.1 *Schlüsselreaktionen über Summenformeln.* Je nach Wahl der freien Unbekannten erhält man verschiedene Sätze von Schlüsselreaktionen. Für die $N = 5$ Komponenten CO, H₂O, CO₂, H₂, CH₄ verwende man den Ansatz $\nu_1 \text{CO} + \nu_2 \text{H}_2\text{O} + \nu_3 \text{CO}_2 + \nu_4 \text{H}_2 + \nu_5 \text{CH}_4 = 0$ und als freie Unbekannte (a) ν_1, ν_3 wie im Abschnitt 2.3; (b) ν_1, ν_2 ; (c) ν_3, ν_5 .

Ergebnis: (a) $\text{CO} + 3\text{H}_2 = \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$, $\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 = \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$;
 (b) $2\text{CO} + 2\text{H}_2 = \text{CO}_2 + \text{CH}_4$, $\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 = \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$;
 (c) $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + \text{H}_2$, $\text{CO} + 3\text{H}_2 = \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$.

Übungsaufgabe 2.2 *Schlüsselreaktionen über Summenformeln.* Ein Satz von Schlüsselreaktionen ist zu bestimmen für die bei der Ammoniak-Verbrennung auftretenden Komponenten NH₃, O₂, N₂, NO, NO₂, N₂O₃, H₂O.

Ergebnis: $M = 4$ Schlüsselreaktionen, z. B. (1) $\text{N}_2 + \text{O}_2 = 2\text{NO}$; (2) $\text{N}_2 + 2\text{O}_2 = 2\text{NO}_2$; (3) $2\text{N}_2 + 3\text{O}_2 = 2\text{N}_2\text{O}_3$; (4) $\text{N}_2 + 3\text{H}_2\text{O} = 2\text{NH}_3 + 1,5\text{O}_2$.

Übungsaufgabe 2.3 *Schlüsselreaktionen über Summenformeln.* Ein Satz von Schlüsselreaktionen ist zu ermitteln für die Komponenten C₆H₆ (Benzol), C₇H₈ (Toluol), CO, CO₂, O₂, H₂O, N₂.

Ergebnis: $M = 3$ Schlüsselreaktionen, z. B. (1) $\text{C}_6\text{H}_6 + 7,5\text{O}_2 = 6\text{CO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$; (2) $\text{C}_7\text{H}_8 + 9\text{O}_2 = 7\text{CO}_2 + 4\text{H}_2\text{O}$; (3) $\text{CO} + 0,5\text{O}_2 = \text{CO}_2$.

2.4 Zusammensetzungsangaben

Die Zusammensetzung eines chemisch reagierenden Gemisches, das aus einer beliebigen Anzahl von Komponenten A_i , $i = 1, \dots, N$, besteht, lässt sich durch unterschiedliche Größen spezifizieren. Welche Angaben man letztlich verwendet, hängt von der jeweiligen Aufgabenstellung oder der Zweckmäßigkeit bestimmter Größen ab. Unterschiedliche Zusammensetzungsangaben lassen sich jedoch stets ineinander umrechnen.

Extensive Größen. Hierunter versteht man alle der Stoffmenge proportionalen Größen. Neben den *Stoffmengen* n_i der *Komponenten* selbst werden insbesondere die *Komponentenmassen* m_i benutzt; es gilt

$$m_i = M_i n_i, \quad (2.17)$$

worin M_i die *molare Masse der Komponente* i bezeichnet. Die *gesamte Stoffmenge* n bzw. die *Gesamtmasse* m erhält man, wenn alle Stoffmengen bzw. Massen der Komponenten summiert werden,

$$n = \sum_{i=1}^N n_i, \quad m = \sum_{i=1}^N m_i. \quad (2.18)$$

Tab. 2.2 Zusammensetzungsangaben für Gemische aus $i = 1, \dots, N$ Komponenten A_i .

Größe	Definition	weitere Größe oder Beziehung	
Stoffmengenanteil	$x_i = n_i / n$	$\sum_{i=1}^N x_i = 1$	(2.19)
Massenanteil	$w_i = m_i / m$	$\sum_{i=1}^N w_i = 1$	(2.20)
Konzentration	$c_i = n_i / V$	Gesamtkonzentration $C = \sum_{i=1}^N c_i$	(2.21)
Partialdichte	$\rho_i = m_i / V$	Gesamtdichte $\rho = \sum_{i=1}^N \rho_i$	(2.22)
Partialdruck	$p_i = P x_i$	Gesamtdruck $P = \sum_{i=1}^N p_i$	(2.23)

Intensive Größen. Bezieht man extensive Größen auf die gesamte Stoffmenge, die Gesamtmasse oder das *Gesamtvolumen* V , so gewinnt man die in Tab. 2.2 zusammengestellten Größen *Stoffmengenanteil* x_i , *Massenanteil* w_i , *Konzentration* c_i und *Partialdichte* ρ_i der Komponenten, die man als intensive Größen bezeichnet.

Stoffmengen- und Massenanteil weisen gegenüber Konzentration und Partialdichte den Vorteil auf, unabhängig von Temperatur T und Druck P zu sein. Die Definition des Partialdrucks ist nur für ideale Gasgemische geeignet; zu realen Gasen vgl. [3, 5, 6].

Alle in Tab. 2.2 enthaltenen Zusammensetzungsangaben sowie (2.17) und (2.18) lassen sich auch auf durchströmte Systeme übertragen. Anstelle der Größen n_i , m_i , n , m und V sind die entsprechenden *Ströme* einzusetzen: der *Stoffmengenstrom* $\dot{n}_i$, der *Massenstrom* $\dot{m}_i$ der Komponente, der *gesamte Stoffmengenstrom* $\dot{n}$, der *Gesamtmassenstrom* $\dot{m}$ und der *Gesamtvolumenstrom* $\dot{V}$.

Die Umrechnung der Zusammensetzungsangaben geschieht über die Definitionsgleichungen (2.17) - (2.23); die Ergebnisse sind in Tab. 2.3 zusammengestellt. Beispielsweise erhält man die Massenanteile aus den Stoffmengenanteilen über

$$w_i = \frac{m_i}{m} = \frac{m_i}{\sum m_k} = \frac{M_i n_i}{\sum M_k n_k} = \frac{M_i n_i}{\sum M_k n_k} \cdot \frac{\frac{1}{n}}{\frac{1}{n}} = \frac{M_i x_i}{\sum M_k x_k} .$$

Tab. 2.3 Umrechnung von Zusammensetzungsangaben (Σ bedeutet Summe über alle $k = 1, \dots, N$ Komponenten).

Gesucht	Gegeben			
	x_i	w_i	c_i	ρ_i
x_i	-	$\frac{w_i / M_i}{\Sigma w_k / M_k}$	$\frac{c_i}{C}$	$\frac{\rho_i / M_i}{\Sigma \rho_k / M_k}$
w_i	$\frac{M_i x_i}{\Sigma M_k x_k}$	-	$\frac{M_i c_i}{\Sigma M_k c_k}$	$\frac{\rho_i}{\rho}$
c_i	$\frac{\rho x_i}{\Sigma M_k x_k}$	$\frac{\rho w_i}{M_i}$	-	$\frac{\rho_i}{M_i}$
ρ_i	$\rho \frac{M_i x_i}{\Sigma M_k x_k}$	ρw_i	$c_i M_i$	-

Chemische Reaktionstechnik

Müller-Erlwein, E.

2015, XII, 273 S. 116 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-658-09395-2