

# IChO 1978

Theorieaufgaben und Lösungen · Toruń, Polen · 5 Theorieaufgaben mit vollständigen Lösungen

[eulersolve.org/icho/1978/](http://eulersolve.org/icho/1978/)

## Aufgabe 1: Analyse eines Chromerzes

- a) Ein wasserfreies Chromerz besteht aus:  $\text{Fe}(\text{CrO}_2)_2$ ,  $\text{Mg}(\text{CrO}_2)_2$ ,  $\text{MgCO}_3$  und  $\text{CaSiO}_3$ .
- b) Die Analyse ergab, dass das Erz 45.6 %  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ , 7.98 %  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  und 16.12 %  $\text{MgO}$  enthält.
- c) Bei der Behandlung des Erzes mit konzentrierter Salzsäure reagierten die im Erz vorhandenen Chromverbindungen nicht mit der Säure.
- d) Nach Abschluss der Reaktion wurde das Erz gründlich mit Wasser gewaschen (bis der Nachweis von  $\text{Cl}^-$  negativ ausfiel), und der feste Rückstand wurde bis zur Massenkonstanz getrocknet.

Aufgaben:

**1.1** Geben Sie die stöchiometrischen Gleichungen und die Ionengleichungen für die Reaktionen an, die bei der Behandlung des Erzes mit Salzsäure gemäß c) ablaufen.

**1.2** Berechnen Sie:

- die Gehalte der im Erz vorhandenen Verbindungen (in Massen-%),
- die Stoffmengen der im Erz vorhandenen Verbindungen.

**1.3** Berechnen Sie den Gehalt an  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  (in Massen-%) im gemäß d) erhaltenen getrockneten Rückstand.

**1.4** Ein Glasrohr wurde mit einer ausreichenden Menge an granuliertem  $\text{CaO}$  gefüllt; die Gesamtmasse des gefüllten Rohres betrug 412.02 g. Das bei der Reaktion gemäß c) entstandene Gas wurde getrocknet und anschließend durch das Glasrohr geleitet. Berechnen Sie die Masse des Glasrohres samt Füllung nach Abschluss der Reaktion.

Relative Atommassen:

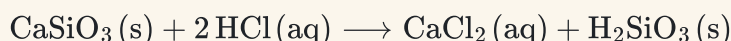
$$A_r(\text{Cr}) = 52.01; \quad A_r(\text{Fe}) = 55.85; \quad A_r(\text{Mg}) = 24.32; \quad A_r(\text{Ca}) = 40.08;$$

$$A_r(\text{Si}) = 28.09; \quad A_r(\text{C}) = 12.01; \quad A_r(\text{O}) = 16.00.$$

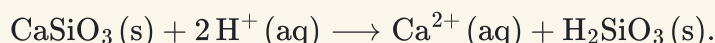
Aufgabentext aus dem offiziellen englischen Text übersetzt.

## Antworten

- 1.1 Die Stoffgleichungen lauten



und die Netto-Ionengleichungen lauten



Dabei steht  $\text{H}_2\text{SiO}_3$  konventionell für ausgefälltes hydratisiertes Siliciumdioxid. Beide Chromite bleiben unverändert.

- 1.2 Bezogen auf **100 g Erz**:

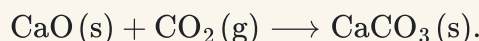
| Verbindung                                     | Massenanteil | Stoffmenge je 100 g Erz |
|------------------------------------------------|--------------|-------------------------|
| Eisen(II)-chromit, $\text{Fe}(\text{CrO}_2)_2$ | 22.4%        | 0.0999 mol              |
| Magnesiumchromit, $\text{Mg}(\text{CrO}_2)_2$  | 38.5%        | 0.200 mol               |
| Magnesiumcarbonat, $\text{MgCO}_3$             | 16.8%        | 0.200 mol               |
| Calciumsilicat, $\text{CaSiO}_3$               | 22.3%        | 0.192 mol               |

Für eine Erzprobe der Masse  $m$  sind diese Stoffmengen mit  $m/(100 \text{ g})$  zu multiplizieren.

- 1.3 Unter der Annahme, dass das hydratisierte Siliciumdioxid zu wasserfreiem Siliciumdioxid,  $\text{SiO}_2$ , getrocknet wird, gilt

$$w(\text{Cr}_2\text{O}_3) = 63.0\%.$$

- 1.4 Calciumoxid absorbiert das Kohlenstoffdioxid:



Für eine Erzprobe der Masse  $m$  gilt

$$m_{\text{tube,final}} = 412.02 \text{ g} + 0.08792 m.$$

Für  $m = 100 \text{ g}$  beträgt die Endmasse 420.81 g. In der vorliegenden Aufgabenstellung ist die Erzmasse nicht angegeben, sodass keine vorbehaltlose Zahlenangabe möglich ist.

## Lösung

### 1.1 — Reaktionen mit Salzsäure

Die beiden Chromite reagieren nicht, wie in der Aufgabenstellung ausdrücklich angegeben.

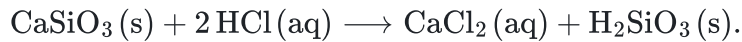
Magnesiumcarbonat reagiert mit Säure, da durch die Protonierung von Carbonat Kohlenstoffdioxid und Wasser entstehen. Magnesiumchlorid bleibt in Lösung:



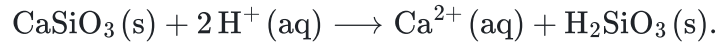
Nach Weglassen der nicht an der Reaktion beteiligten Chloridionen ergibt sich



Calciumsilicat reagiert mit Säure zu löslichem Calciumchlorid und unlöslichem hydratisiertem Siliciumdioxid, das konventionell als Metakieselsäure geschrieben wird:



Die zugehörige Netto-Ionengleichung lautet



Die hier verwendeten molekularen und ionischen Spezies haben die folgenden Namen und SMILES:

| Spezies                       | Name                                                  | SMILES        |
|-------------------------------|-------------------------------------------------------|---------------|
| HCl                           | Chlorwasserstoff; seine wässrige Lösung ist Salzsäure | Cl            |
| H <sup>+</sup>                | Wasserstoffion                                        | [H+]          |
| Cl <sup>-</sup>               | Chloridion                                            | [Cl-]         |
| Mg <sup>2+</sup>              | Magnesium(II)-Ion                                     | [Mg+2]        |
| Ca <sup>2+</sup>              | Calcium(II)-Ion                                       | [Ca+2]        |
| CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> | Carbonation, in den Carbonatsalzen vorhanden          | [O-]C(=O)[O-] |
| CO <sub>2</sub>               | Kohlenstoffdioxid                                     | O=C=O         |
| H <sub>2</sub> O              | Wasser                                                | O             |

Die formal monomere **Metakieselsäure**, H<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>, lässt sich durch o[Si](=O)o darstellen. Der tatsächliche Niederschlag ist ein Netzwerk aus hydratisiertem Siliciumdioxid; diese molekulare SMILES-Darstellung beschreibt seine polymere Struktur nicht. Ebenso sind die kristallinen Salze, Chromite und festen Oxide ausgedehnte Festkörper, deren Kristallstrukturen sich nicht durch eine einzelne molekulare SMILES-Darstellung angeben lassen. Auch die Hydratation in wässriger Lösung wird durch die ionischen SMILES nicht dargestellt.

## 1.2 — Zusammensetzung und Stoffmengen

Als Berechnungsgrundlage werden **100 g Erz** gewählt. Dies ist eine zweckmäßige Normierung, da keine tatsächliche Probenmasse angegeben ist.

Die angegebenen Oxidanteile sind **analytische Äquivalente**, keine zusätzlichen Verbindungen im Erz. Somit entspricht die Analyse:

$$m(\text{Cr}_2\text{O}_3) = 45.6 \text{ g}, \quad m(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 7.98 \text{ g}, \quad m(\text{MgO}) = 16.12 \text{ g}.$$

Für die beiden Chromite werden die kürzeren Formeln FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> und MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> verwendet. Ihre Stoffmengen seien  $x$  bzw.  $y$ , und die Stoffmengen von Magnesiumcarbonat und Calciumsilicat seien  $z$  bzw.  $t$ .

Die benötigten molaren Massen, berechnet aus den angegebenen Atommassen, sind:

| Verbindung                       | Molare Masse / g mol <sup>-1</sup> |
|----------------------------------|------------------------------------|
| Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>   | 152.02                             |
| Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>   | 159.70                             |
| MgO                              | 40.32                              |
| FeCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> | 223.87                             |
| MgCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> | 192.34                             |
| MgCO <sub>3</sub>                | 84.33                              |
| CaSiO <sub>3</sub>               | 116.17                             |

Das gesamte Eisen liegt als Eisen(II)-chromit vor. Ein Mol Eisen(III)-oxid als Äquivalent entspricht zwei Mol Eisen, also gilt

$$x = 2 \frac{7.98 \text{ g}}{159.70 \text{ g mol}^{-1}} = 0.0999374 \text{ mol.}$$

Jedes Mol der beiden Chromite enthält zwei Mol Chromatome und entspricht daher einem Mol Chrom(III)-oxid als Äquivalent:

$$x + y = \frac{45.6 \text{ g}}{152.02 \text{ g mol}^{-1}} = 0.2999605 \text{ mol.}$$

Daraus folgt

$$y = 0.2999605 - 0.0999374 = 0.2000231 \text{ mol.}$$

Magnesium liegt als Magnesiumchromit und Magnesiumcarbonat vor. Beide enthalten ein Magnesiumatom je Formeleinheit, woraus sich ergibt

$$y + z = \frac{16.12 \text{ g}}{40.32 \text{ g mol}^{-1}} = 0.3998016 \text{ mol,}$$

und somit

$$z = 0.3998016 - 0.2000231 = 0.1997784 \text{ mol.}$$

Unter Beibehaltung zusätzlicher Stellen zur Vermeidung von Rundungsfehlern ergeben sich die Massen

$$\begin{aligned} m(\text{FeCr}_2\text{O}_4) &= (0.0999374)(223.87) \text{ g} = 22.37298 \text{ g,} \\ m(\text{MgCr}_2\text{O}_4) &= (0.2000231)(192.34) \text{ g} = 38.47245 \text{ g,} \\ m(\text{MgCO}_3) &= (0.1997784)(84.33) \text{ g} = 16.84732 \text{ g.} \end{aligned}$$

Da diese Verbindungen und Calciumsilicat die einzigen Bestandteile sind, gilt

$$m(\text{CaSiO}_3) = 100 - 22.37298 - 38.47245 - 16.84732 = 22.30725 \text{ g,}$$

also

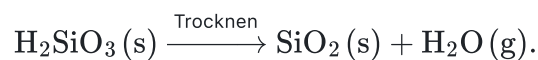
$$t = \frac{22.30725 \text{ g}}{116.17 \text{ g mol}^{-1}} = 0.1920225 \text{ mol.}$$

Bei einer Bezugsmasse von 100 g entsprechen die Zahlenwerte der Massen in Gramm den Massenanteilen in Prozent. Durch Rundung erhält man die unter **Antworten** aufgeführten Ergebnisse.

### 1.3 — Chromgehalt des getrockneten Rückstands

Durch das Waschen werden gelöstes Magnesiumchlorid, Calciumchlorid und überschüssige Salzsäure entfernt. Der Rückstand enthält die beiden unveränderten Chromite und den Siliciumdioxid-Niederschlag.

Unter der üblichen Annahme, dass das hydratisierte Siliciumdioxid beim Trocknen entwässert wird, gilt



Jedes Mol Calciumsilicat hinterlässt somit ein Mol Siliciumdioxid. Dessen molare Masse beträgt

$$M(\text{SiO}_2) = 28.09 + 2(16.00) = 60.09 \text{ g mol}^{-1},$$

und seine Masse beträgt

$$m(\text{SiO}_2) = (0.1920225 \text{ mol})(60.09 \text{ g mol}^{-1}) = 11.53863 \text{ g.}$$

Somit gilt

$$m_{\text{residue}} = 22.37298 + 38.47245 + 11.53863 = 72.38406 \text{ g.}$$

Das gesamte Chrom verbleibt im Rückstand, sodass sein Chrom(III)-oxid-Äquivalent weiterhin 45.6 g beträgt:

$$w(\text{Cr}_2\text{O}_3) = \frac{45.6}{72.38406} \times 100\% = 62.9973\% \approx \boxed{63.0\%}.$$

Dieser Prozentwert drückt den Chromgehalt **als Oxidäquivalent** aus; er bedeutet nicht, dass freies Chrom(III)-oxid entstanden ist.

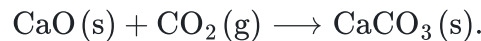
#### 1.4 — Endmasse des Absorptionsrohres

Das freigesetzte Gas ist Kohlenstoffdioxid, das ausschließlich aus Magnesiumcarbonat entsteht:

$$n(\text{CO}_2) = n(\text{MgCO}_3) = 0.1997784 \text{ mol}$$

je 100 g Erz.

Das Gas wird getrocknet und anschließend von Calciumoxid unter Bildung von Calciumcarbonat absorbiert:



Da ausreichend Calciumoxid vorhanden ist, nimmt die Masse des Rohres um die gesamte Masse des Kohlenstoffdioxids zu. Mit

$$M(\text{CO}_2) = 12.01 + 2(16.00) = 44.01 \text{ g mol}^{-1},$$

beträgt die Massenzunahme je 100 g Erz

$$\Delta m = (0.1997784 \text{ mol})(44.01 \text{ g mol}^{-1}) = 8.79225 \text{ g}.$$

Für eine tatsächliche Erzmasse  $m$  gilt folglich

$$m_{\text{tube,final}} = 412.02 \text{ g} + (8.79225 \text{ g}) \frac{m}{100 \text{ g}}.$$

Für eine **100-g-Probe** ergibt sich daraus

$$m_{\text{tube,final}} = 412.02 + 8.79225 \approx \boxed{420.81 \text{ g}}.$$

Die Lösung wurde mit der offiziellen Lösung abgeglichen. Wo diese Lösung von der offiziellen Lösung abweicht, enthält die offizielle Lösung einen Fehler oder Druckfehler.

## Aufgabe 2: Durch $\text{Fe}^{2+}$ und $\text{Ca}^{2+}$ verursachte Wasserhärte

Eine untersuchte Wasserprobe hatte eine temporäre Härte von  $10^\circ$  und eine permanente Härte von  $10^\circ$ . Die Wasserhärte wurde ausschließlich durch die Kationen  $\text{Fe}^{2+}$  und  $\text{Ca}^{2+}$  verursacht.

Es stand ein Volumen von  $10.00 \text{ dm}^3$  dieses Wassers zur Verfügung. Davon wurden  $100.00 \text{ cm}^3$  für die weitere Untersuchung entnommen. Das Wasser wurde mit einer  $\text{H}_2\text{O}_2$ -Lösung oxidiert und anschließend mit einer wässrigen Ammoniaklösung versetzt, um einen Niederschlag zu fällen. Ein brauner Niederschlag wurde getrocknet; nach geeignetem Erhitzen wurden  $0.01432 \text{ g}$  eines wasserfreien Produkts erhalten.

Aufgaben:

**2.1** Berechnen Sie das Stoffmengenverhältnis von  $\text{Fe}^{2+} : \text{Ca}^{2+}$  im untersuchten Wasser.

**2.2** In einem weiteren Versuch wurden erneut  $10.00 \text{ dm}^3$  des Wassers verwendet. Zunächst wurde die durch die Kationen  $\text{Ca}^{2+}$  verursachte temporäre Härte entfernt, und die durch die Kationen  $\text{Fe}^{2+}$  verursachte permanente Härte wurde durch Zugabe von  $\text{Na}_3\text{PO}_4$  entfernt. Berechnen Sie die Masse des Niederschlags (in seiner wasserfreien Form) unter der Annahme, dass in  $10.00 \text{ dm}^3$  des untersuchten Wassers nur die Hälfte der Kationen  $\text{Fe}^{2+}$  zu  $\text{Fe}^{3+}$  oxidiert wurde. Die Berechnung soll auf ein Hundertstel genau erfolgen. Geben Sie das Stoffmengenverhältnis in ganzen Zahlen an.

1° Härte = 10 mg CaO in 1 dm<sup>3</sup> Wasser.

Relative Atommassen:

$$\begin{array}{lll} A_r(\text{Ca}) = 40.08; & A_r(\text{Fe}) = 55.85; & A_r(\text{C}) = 12.01; \\ A_r(\text{H}) = 1.01; & A_r(\text{P}) = 31.00; & A_r(\text{O}) = 16.00. \end{array}$$

Aufgabentext aus dem offiziellen englischen Text übersetzt.

## Antworten

- **2.1:** Das beabsichtigte ganzzahlige Stoffmengenverhältnis beträgt näherungsweise

$$\boxed{\text{Fe}^{2+} : \text{Ca}^{2+} = 1 : 1}.$$

Aus den abgedruckten Zahlenangaben ergibt sich 1.01150 : 1.

- **2.2:** Die wasserfreien Niederschläge aus beiden Entfernungsschritten wiegen zusammen

$$\boxed{4.20 \text{ g}}.$$

Der Eisenphosphat-Niederschlag allein wiegt  $\boxed{2.42 \text{ g}}$ . Bei diesen Ergebnissen werden der gemessene Eisengehalt und die Gesamthärte beibehalten.

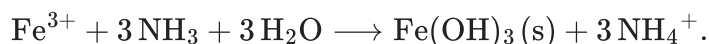
## Lösung

### 2.1 — Bestimmung des Verhältnisses von Eisen zu Calcium

Wasserstoffperoxid oxidiert Eisen(II) zu Eisen(III). Die ausgeglichene Oxidationsgleichung, für saures Milieu formuliert, lautet



Wässrige Ammoniaklösung fällt anschließend braunes, wasserhaltiges Eisen(III)-hydroxid, das üblicherweise als  $\text{Fe}(\text{OH})_3$  dargestellt wird:



Bei dem vorgesehenen gravimetrischen Verfahren bleibt Calcium in Lösung. Durch Erhitzen des Eisenniederschlags wird Wasser entfernt, und es entsteht wasserfreies Eisen(III)-oxid:



Das gewogene Produkt ist somit  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  mit der molaren Masse

$$M(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 2(55.85) + 3(16.00) = 159.70 \text{ g mol}^{-1}.$$

Die ursprünglich im Aliquot von 100.00 cm<sup>3</sup> enthaltene Stoffmenge an Eisen beträgt daher

$$n_{\text{Fe}} = 2n(\text{Fe}_2\text{O}_3) = \frac{2(0.01432 \text{ g})}{159.70 \text{ g mol}^{-1}} = 1.7933626 \times 10^{-4} \text{ mol}.$$

Die Gesamthärte beträgt

$$10^\circ + 10^\circ = 20^\circ,$$

entsprechend 200 mg CaO pro Kubikdezimeter. Das Aliquot enthält folglich

$$m_{\text{CaO,equiv}} = (0.200 \text{ g dm}^{-3})(0.10000 \text{ dm}^3) = 0.02000 \text{ g}.$$

Beide härtebildenden Kationen sind zweiwertig, sodass ein Mol jedes dieser Kationen denselben Beitrag zur Härte leistet wie ein Mol CaO. Mit

$$M(\text{CaO}) = 40.08 + 16.00 = 56.08 \text{ g mol}^{-1},$$

erhalten wir

$$n_{\text{Fe}} + n_{\text{Ca}} = \frac{0.02000}{56.08} = 3.5663338 \times 10^{-4} \text{ mol.}$$

Somit gilt

$$n_{\text{Ca}} = (3.5663338 - 1.7933626) \times 10^{-4} = 1.7729713 \times 10^{-4} \text{ mol,}$$

und

$$\frac{n_{\text{Fe}}}{n_{\text{Ca}}} = \frac{1.7933626}{1.7729713} = 1.01150.$$

Das beabsichtigte einfache ganzzahlige Verhältnis beträgt daher näherungsweise

$$\boxed{\text{Fe}^{2+} : \text{Ca}^{2+} = 1 : 1}.$$

Im Folgenden werden die ungerundeten Stoffmengen verwendet, anstatt ein exaktes Verhältnis von 1 : 1 vorzugeben.

## 2.2 — Masse der wasserfreien Niederschläge

Das Volumen in diesem Versuch beträgt das 100-Fache des Aliquotvolumens. Daher gilt

$$n_{\text{Fe, total}} = 0.017933626 \text{ mol,} \quad n_{\text{Ca}} = 0.017729713 \text{ mol.}$$

Die temporäre Calciumhärte wird durch Erhitzen entfernt, wobei Calciumcarbonat ausfällt:



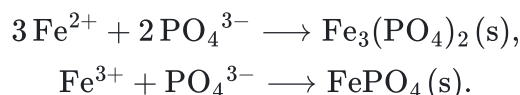
Seine molare Masse und die ausgefällte Masse betragen

$$\begin{aligned} M(\text{CaCO}_3) &= 40.08 + 12.01 + 3(16.00) = 100.09 \text{ g mol}^{-1}, \\ m(\text{CaCO}_3) &= (0.017729713)(100.09) = 1.774567 \text{ g.} \end{aligned}$$

Die Hälfte des Eisens verbleibt als Eisen(II), die andere Hälfte wird zu Eisen(III) oxidiert:

$$n(\text{Fe}^{2+}) = n(\text{Fe}^{3+}) = \frac{0.017933626}{2} = 0.008966813 \text{ mol.}$$

Durch Zugabe von Trinatriumphosphat werden Phosphationen zugeführt. Die beiden Fällungsreaktionen lauten



Die Produkte sind Eisen(II)-phosphat beziehungsweise Eisen(III)-phosphat. Ihre Stoffmengen betragen

$$\begin{aligned} n(\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2) &= \frac{0.008966813}{3} = 0.002988938 \text{ mol,} \\ n(\text{FePO}_4) &= 0.008966813 \text{ mol.} \end{aligned}$$

Für die molaren Massen der wasserfreien Verbindungen gilt

$$\begin{aligned} M(\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2) &= 3(55.85) + 2[31.00 + 4(16.00)] = 357.55 \text{ g mol}^{-1}, \\ M(\text{FePO}_4) &= 55.85 + 31.00 + 4(16.00) = 150.85 \text{ g mol}^{-1}. \end{aligned}$$

Somit gilt

$$m(\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2) = (0.002988938)(357.55) = 1.068695 \text{ g,}$$

$$m(\text{FePO}_4) = (0.008966813)(150.85) = 1.352644 \text{ g.}$$

Der Phosphatniederschlag allein wiegt daher

$$m_{\text{phosphates}} = 1.068695 + 1.352644 = 2.421338 \text{ g} \approx 2.42 \text{ g}.$$

Unter Einbeziehung des im ersten Schritt ausgefällten Calciumcarbonats ergibt sich

$$m_{\text{all precipitates}} = 1.774567 + 2.421338 = 4.195905 \text{ g} \approx 4.20 \text{ g}.$$

### Namen und SMILES der verwendeten chemischen Spezies

Bei ionischen Feststoffen stellen die nachstehenden SMILES mit unverbundenen Komponenten formale Formeleinheiten dar. Sie beschreiben weder das Kristallgitter noch die Hydratation oder die Koordinationsgeometrie der Metallionen; wasserhaltiges Eisen(III)-hydroxid ist keine diskrete molekulare Spezies.

| Spezies und Name                                  | SMILES                                                       |
|---------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
| $\text{Fe}^{2+}$ , Eisen(II)-Ion                  | [Fe+2]                                                       |
| $\text{Fe}^{3+}$ , Eisen(III)-Ion                 | [Fe+3]                                                       |
| $\text{Ca}^{2+}$ , Calciumion                     | [Ca+2]                                                       |
| $\text{H}^+$ , Wasserstoffion                     | [H+]                                                         |
| $\text{H}_2\text{O}_2$ , Wasserstoffperoxid       | OO                                                           |
| $\text{H}_2\text{O}$ , Wasser                     | O                                                            |
| $\text{NH}_3$ , Ammoniak                          | N                                                            |
| $\text{NH}_4^+$ , Ammoniumion                     | [NH4+]                                                       |
| $\text{Fe}(\text{OH})_3$ , Eisen(III)-hydroxid    | [Fe+3].[OH-].[OH-].[OH-]                                     |
| $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , Eisen(III)-oxid         | [Fe+3].[Fe+3].[O-2].[O-2].[O-2]                              |
| $\text{CaO}$ , Calciumoxid                        | [Ca+2].[O-2]                                                 |
| $\text{HCO}_3^-$ , Hydrogencarbonation            | OC(=O)[O-]                                                   |
| $\text{CO}_2$ , Kohlenstoffdioxid                 | O=C=O                                                        |
| $\text{CaCO}_3$ , Calciumcarbonat                 | [Ca+2].[O-]C(=O)[O-]                                         |
| $\text{Na}_3\text{PO}_4$ , Trinatriumphosphat     | [Na+].[Na+].[Na+].[O-]P(=O)([O-])[O-]                        |
| $\text{PO}_4^{3-}$ , Phosphation                  | [O-]P(=O)([O-])[O-]                                          |
| $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$ , Eisen(II)-phosphat | [Fe+2].[Fe+2].[Fe+2].[O-]P(=O)([O-])[O-].[O-]P(=O)([O-])[O-] |
| $\text{FePO}_4$ , Eisen(III)-phosphat             | [Fe+3].[O-]P(=O)([O-])[O-]                                   |

Die Lösung wurde mit der offiziellen Lösung abgeglichen.

## Aufgabe 3: Verchromung

Die Verchromung erfolgt üblicherweise durch Elektrolyse in einer Chromsäurelösung. Die zu verchromenden Gegenstände bilden die Kathode. Die Anode besteht aus einer Legierung, die unter den gegebenen Bedingungen inert ist, d. h. weder chemisch noch elektrochemisch reagiert.

Eine Elektrolysezelle wurde mit  $100.0 \text{ dm}^3$  einer wässrigen Lösung gefüllt, die  $0.230 \text{ kg}$  Chromsäureanhydrid in  $1 \text{ dm}^3$  Lösung enthielt.

Bei der Elektrolyse floss 10.0 Stunden lang ein Strom von 1500 A durch den Elektrolyten. Nach der Elektrolyse betrug die Massenzunahme der Kathode 0.679 kg.

Das Verhältnis der Gasvolumina betrug

$$\frac{V_C}{V_A} = 1.603$$

wobei  $V_C$  das Volumen der an der Kathode entwickelten Gase und  $V_A$  das Volumen der an der Anode entwickelten Gase bezeichnet. Beide Volumina wurden unter denselben Bedingungen gemessen.

Aufgaben

**3.1** Welcher Anteil der gesamten Ladung (in %) wurde für die Abscheidung von 0.679 kg Chrom verwendet?

**3.2** Berechnen Sie:

a) das Volumenverhältnis der beiden Gase (unter Standardbedingungen, STP), die als Nebenprodukte an der Kathode und der Anode entwickelt werden,

b) die Stromausbeuten der entsprechenden Reaktionen, die bei der Gasentwicklung jeweils an der Kathode und der Anode ablaufen.

Falls Sie eine Diskrepanz zwischen den berechneten und den in der Aufgabe angegebenen Daten feststellen, versuchen Sie zu erklären, welcher bisher nicht berücksichtigte Prozess in der Elektrolysezelle ablaufen könnte.

Schreiben Sie die entsprechende Gesamtgleichung für die Reaktionen an den Elektroden auf und korrigieren Sie, wenn möglich, Ihre vorherigen Berechnungen.

Aufgabentext aus dem offiziellen englischen Text übersetzt.

## Antworten

- **3.1:** Der zur Abscheidung von Chrom verwendete Ladungsanteil beträgt 14.0%.
- **3.2(a):** Die Gase sind Wasserstoff an der Kathode und Sauerstoff an der Anode. Berücksichtigt man nur die Chromabscheidung und die Gasentwicklung, ergibt sich  $V_C/V_A = 1.720$ . Unter Einbeziehung des geschlossenen Chrom(VI)/Chrom(III)-Kreislaufs erhält man das gemessene Verhältnis 1.603 mit den korrigierten Gasvolumina unter Standardbedingungen (STP)

$$V_C = 3.55 \times 10^3 \text{ dm}^3, \quad V_A = 2.21 \times 10^3 \text{ dm}^3.$$

- **3.2(b):** Die zunächst berechneten Stromausbeuten der Gasentwicklung betragen 86.0% für Wasserstoff und 100% für Sauerstoff. Die korrigierten Stromausbeuten sind

$$\eta_{\text{H}_2} = 56.5\%, \quad \eta_{\text{O}_2} = 70.5\%.$$

Die Reduktion von Chrom(VI) zu Chrom(III) und die umgekehrte Oxidation verbrauchen an der jeweiligen Elektrode 29.5% der Ladung.

## Lösung

Wir verwenden

$$F = 96485 \text{ C mol}^{-1}, \quad M(\text{Cr}) = 52.00 \text{ g mol}^{-1},$$

und das molare Volumen eines idealen Gases  $V_m = 22.414 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$  unter Standardbedingungen (STP), hier als 273.15 K und 1 atm festgelegt.

Im Folgenden werden diese chemischen Spezies verwendet:

| Spezies                  | Name                               | SMILES                      |
|--------------------------|------------------------------------|-----------------------------|
| $\text{CrO}_3$           | Chrom(VI)-oxid, Chromsäureanhydrid | <chem>O=[Cr](=O)=O</chem>   |
| $\text{H}_2\text{CrO}_4$ | Chromsäure                         | <chem>O=[Cr](=O)(O)O</chem> |
| $\text{Cr}^{3+}$         | Chrom(III)-Ion                     | <chem>[Cr+3]</chem>         |
| $\text{H}^+$             | Wasserstoffion, Proton             | <chem>[H+]</chem>           |
| $\text{H}_2\text{O}$     | Wasser                             | <chem>O</chem>              |
| $\text{H}_2$             | Wasserstoff                        | <chem>[H][H]</chem>         |
| $\text{O}_2$             | Sauerstoff                         | <chem>O=O</chem>            |
| $\text{Cr}$              | Chrom                              | <chem>[Cr]</chem>           |

Die SMILES der Ionen berücksichtigen die Hydratation nicht, und [Cr] stellt ein Atom und kein Metallgitter dar. Der SMILES des Oxids ist eine formale molekulare Darstellung; O=O spezifiziert den Triplett-Grundzustand des Sauerstoffs nicht. Gelöstes Chrom(VI) wird in den folgenden Bilanzen formal als  $\text{H}_2\text{CrO}_4$  dargestellt.

### 3.1 — Für die Chromabscheidung verwendete Ladung

Chrom liegt zunächst in der Oxidationsstufe +6 vor, sodass seine Nettoerduktion zum Metall sechs Elektronen pro Chromatom erfordert:



Die insgesamt geflossene Ladung beträgt

$$Q = It = (1500 \text{ A})(10.0 \times 3600 \text{ s}) = 5.40 \times 10^7 \text{ C}.$$

Die Stoffmenge des abgeschiedenen Chroms beträgt

$$n_{\text{Cr}} = \frac{679 \text{ g}}{52.00 \text{ g mol}^{-1}} = 13.0577 \text{ mol}.$$

Folglich gilt

$$Q_{\text{Cr}} = 6Fn_{\text{Cr}} = 7.559 \times 10^6 \text{ C},$$

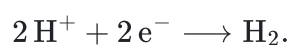
und

$$\eta_{\text{Cr}} = \frac{Q_{\text{Cr}}}{Q} \times 100\% = 14.0\%.$$

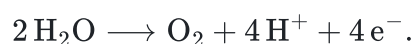
Dies ist der Ladungsbedarf für die Gesamterduktion von Chrom(VI) zu metallischem Chrom, unabhängig von zwischenzeitlichen Reduktionsschritten.

### 3.2(a) — Anfängliche Berechnung des Gasvolumenverhältnisses

Im sauren Elektrolyten wird an der Kathode Wasserstoff entwickelt:



An der inerten Anode kann Wasser zu Sauerstoff oxidiert werden:



Nehmen wir zunächst an, dass diese gasbildenden Reaktionen und die Chromabscheidung die einzigen Elektrodenreaktionen sind. Dann gilt

$$n_{\text{H}_2}^{(0)} = \frac{Q - Q_{\text{Cr}}}{2F} = 240.66 \text{ mol},$$

$$n_{\text{O}_2}^{(0)} = \frac{Q}{4F} = 139.92 \text{ mol}.$$

Bei gleicher Temperatur und gleichem Druck sind Gasvolumina proportional zu den Stoffmengen. Daher gilt

$$\begin{aligned} \left( \frac{V_{\text{C}}}{V_{\text{A}}} \right)_0 &= \frac{(Q - Q_{\text{Cr}})/(2F)}{Q/(4F)} \\ &= 2 \left( 1 - \frac{Q_{\text{Cr}}}{Q} \right) \\ &= \boxed{1.720}. \end{aligned}$$

Die entsprechenden anfänglichen Gasvolumina unter Standardbedingungen (STP) wären ungefähr  $5.39 \times 10^3 \text{ dm}^3$  Wasserstoff und  $3.14 \times 10^3 \text{ dm}^3$  Sauerstoff. Ihr Verhältnis weicht vom gemessenen Wert 1.603 ab.

### 3.2(b) — Anfängliche Stromausbeuten

Unter denselben anfänglichen Annahmen gilt

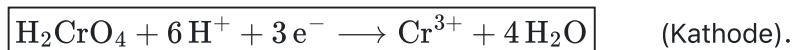
$$\eta_{\text{H}_2}^{(0)} = \frac{Q - Q_{\text{Cr}}}{Q} \times 100\% = \boxed{86.0\%},$$

$$\eta_{\text{O}_2}^{(0)} = \frac{Q}{Q} \times 100\% = \boxed{100\%}.$$

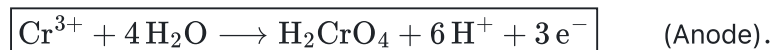
Die Diskrepanz zeigt, dass dieses Reaktionsmodell unvollständig ist.

### 3.2 — Zusätzliche Elektrodenreaktionen und korrigierte Berechnung

Chrom(VI) kann auch zu gelöstem Chrom(III) reduziert werden, ohne dass Metall abgeschieden oder Gas entwickelt wird:



Das Chrom(III) kann anschließend an der Anode wieder oxidiert werden:



An einer inerten Anode kann diese Oxidation einer gelösten Spezies stattfinden, während die Anode selbst chemisch unverändert bleibt.

Bei einem **geschlossenen Redoxkreislauf**, in dem sich netto kein Chrom(III) ansammelt, durchlaufen gleiche Stoffmengen Chrom diese entgegengesetzten Drei-Elektronen-Reaktionen. Somit entfällt an jeder Elektrode dieselbe Ladung  $Q_s$  auf den Kreislauf.

Wir definieren die Ladungsanteile

$$d = \frac{Q_{\text{Cr}}}{Q} = 0.139986, \quad s = \frac{Q_s}{Q}.$$

Die getrennten Ladungsbilanzen der Elektroden ergeben

$$\eta_{\text{H}_2} = 1 - d - s, \quad \eta_{\text{O}_2} = 1 - s,$$

wobei die Stromausbeuten hier als Anteile und nicht als Prozentwerte angegeben sind. Da die Wasserstoffbildung zwei Elektronen pro Molekül benötigt und die Sauerstoffentwicklung vier liefert, gilt

$$1.603 = \frac{V_{\text{C}}}{V_{\text{A}}} = 2 \frac{1 - d - s}{1 - s}.$$

Durch Umstellen erhält man

$$(2 - 1.603)(1 - s) = 2d,$$

also

$$1 - s = \frac{2(0.139986)}{0.397} = 0.705218, \quad s = 0.294782.$$

Daher gilt

$$\boxed{\eta_{\text{O}_2} = 70.5\%},$$

$$\boxed{\eta_{\text{H}_2} = (1 - 0.139986 - 0.294782) \times 100\% = 56.5\%}.$$

Die vollständige Aufteilung der Ladung lautet:

| Elektrode | Nettoprozess                         | Ladungsanteil in Prozent |
|-----------|--------------------------------------|--------------------------|
| Kathode   | Chrom(VI) zu abgeschiedenem Chrom    | 14.0%                    |
| Kathode   | Chrom(VI) zu Chrom(III) im Kreislauf | 29.5%                    |
| Kathode   | Wasserstoffentwicklung               | 56.5%                    |
| Anode     | Chrom(III) zu Chrom(VI) im Kreislauf | 29.5%                    |
| Anode     | Sauerstoffentwicklung                | 70.5%                    |

Die Prozentanteile ergeben an jeder Elektrode zusammen 100%.

Die korrigierten Stoffmengen der Gase betragen

$$n_{\text{H}_2} = \frac{\eta_{\text{H}_2} Q}{2F} = 158.172 \text{ mol},$$

$$n_{\text{O}_2} = \frac{\eta_{\text{O}_2} Q}{4F} = 98.6727 \text{ mol}.$$

Mit ungerundeten Werten erhält man

$$V_{\text{C}} = n_{\text{H}_2} V_{\text{m}} = 3545.28 \text{ dm}^3 \approx \boxed{3.55 \times 10^3 \text{ dm}^3},$$

$$V_{\text{A}} = n_{\text{O}_2} V_{\text{m}} = 2211.65 \text{ dm}^3 \approx \boxed{2.21 \times 10^3 \text{ dm}^3},$$

und

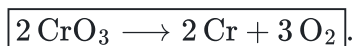
$$\frac{V_{\text{C}}}{V_{\text{A}}} = 1.603.$$

### Gesamtreaktionsbilanz

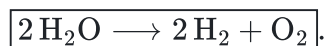
Die beiden Teilreaktionen des Redoxkreislaufs heben sich bei der Addition auf. Die mit der Sauerstoffentwicklung gekoppelte Chromabscheidung ergibt



oder, ausgedrückt mit dem ursprünglichen Säureanhydrid,



Die begleitende Nettoelektrolyse des Wassers lautet



Eine nützliche unabhängige stöchiometrische Kontrolle ist somit

$$n_{\text{O}_2} = \frac{3}{2} n_{\text{Cr}} + \frac{1}{2} n_{\text{H}_2},$$

was die korrigierten Stoffmengen erfüllen.

Das Bad enthält anfangs 23.0 kg  $\text{CrO}_3$ . Durch die Abscheidung werden netto nur

$$(13.0577 \text{ mol})(100.00 \text{ g mol}^{-1}) = 1.31 \text{ kg}$$

verbraucht; der geschlossene Chrom(VI)/Chrom(III)-Kreislauf verursacht keinen zusätzlichen Nettoverbrauch.

Die Lösung wurde mit der offiziellen Lösung abgeglichen.

## Aufgabe 4: Thermische Zersetzung von Ethan in einem geschlossenen Gefäß

Ein Gefäß mit einem Volumen von  $5.0 \text{ dm}^3$  wurde bei einer Temperatur von 300 K und Normaldruck mit Ethan gefüllt und verschlossen. Anschließend wurde das Gefäß mit dem Gas erhitzt und der Druck darin bei verschiedenen Temperaturen gemessen. Dabei wurden folgende Daten ermittelt:

| $T \text{ (K)}$ | Druck $p$ , gemessen (kPa) | Druck $p'$ , berechnet (kPa) |
|-----------------|----------------------------|------------------------------|
| 300             | 101.25                     |                              |
| 500             | 169.20                     |                              |
| 800             | 276.11                     |                              |
| 1000            | 500.48                     |                              |

Aufgaben:

**4.1** Berechnen Sie den Druck  $p'$  des Ethans im Gefäß nach der idealen Gasgleichung und tragen Sie die Werte in die freie Spalte der obigen Tabelle ein.

$$(R = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1})$$

**4.2** Erklären Sie die Unterschiede zwischen dem theoretischen Wert  $p'$  und den durch Messungen erhaltenen Werten ( $p$ ).

**4.3** Geben Sie die chemische Gleichung für die Reaktion an, die bei höheren Temperaturen vermutlich im Gefäß abläuft.

**4.4** Berechnen Sie den Umsatzgrad  $\alpha$  des Ethans und die Gleichgewichtskonstante  $K_p$  der Reaktion, die bei Temperaturen von 800 und 1000 K abläuft.

**4.5** Das Verhältnis der Gleichgewichtskonstanten  $K_p$  bei zwei verschiedenen Temperaturen ist nach der van't-Hoff-Gleichung gleich:

$$\ln \frac{K_1}{K_2} = \frac{\overline{\Delta H}}{R} = \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \\ (\ln = 2.303 \log)$$

Berechnen Sie den Mittelwert  $\overline{\Delta H}$  der Reaktionswärme im Temperaturbereich von 800 – 1000 K.

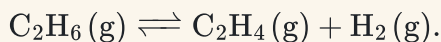
**4.6** Welchen Einfluss hat eine Erhöhung der Temperatur und des Drucks auf den Umsatzgrad des Ethans?

**4.7** Berechnen Sie den relativen Fehler der Berechnung.

Aufgabentext aus dem offiziellen englischen Text übersetzt.

## Antworten

- **4.1** Bei 300, 500, 800 bzw. 1000 K:  $p' = 101.25, 168.75, 270.00, 337.50$  kPa.
- **4.2** Die thermische Zersetzung erhöht die Stoffmenge des Gases, wodurch der Druck über den für unverändertes Ethan vorhergesagten Wert steigt.
- **4.3** Ethan  $\text{CC}$  wird zu Ethen  $\text{C}=\text{C}$  und Wasserstoff  $[\text{H}][\text{H}]$  dehydriert:



- **4.4** Bei 800 K:  $\alpha = 0.0226 = 2.26\%$ ,  $K_p = 0.141$  kPa. Bei 1000 K:  $\alpha = 0.483 = 48.3\%$ ,  $K_p = 152$  kPa. Diese  $K_p$ -Werte verwenden die Konvention des Druckquotienten; die dimensionslosen Werte für  $p^\circ = 100$  kPa sind  $1.41 \times 10^{-3}$  und  $1.52$ .
- **4.5**  $\boxed{\Delta H = +232 \text{ kJ mol}^{-1}}$ , pro Mol umgesetztem Ethan.
- **4.6** Eine Erhöhung der Temperatur erhöht den Umsatz; eine Erhöhung des Drucks durch isotherme Kompression verringert den Umsatz.
- **4.7** Wird „relativer Fehler“ als  $|p' - p|/p$  interpretiert, so betragen die Werte bei 300, 500, 800 bzw. 1000 K 0, 0.266%, 2.21%, 32.6%. Der gesuchte Fehler ist ansonsten nicht näher angegeben.

## Lösung

### 4.1

Sei  $n_0$  die anfängliche Stoffmenge des Ethans. Für die Referenzberechnung bleiben seine Stoffmenge und das Gefäßvolumen konstant:

$$p_0 V = n_0 R T_0, \quad p' V = n_0 R T.$$

Durch Division werden sowohl  $n_0$  als auch  $V$  eliminiert:

$$p' = p_0 \frac{T}{T_0} = (101.25 \text{ kPa}) \frac{T}{300 \text{ K}}.$$

Die vervollständigte Tabelle lautet daher:

| $T$ (K) | Gemessenes $p$ (kPa) | Berechnetes $p'$ (kPa) |
|---------|----------------------|------------------------|
| 300     | 101.25               | 101.25                 |
| 500     | 169.20               | 168.75                 |
| 800     | 276.11               | 270.00                 |
| 1000    | 500.48               | 337.50                 |

### 4.2

Die obige Berechnung setzt voraus, dass die chemische Zusammensetzung beim Erhitzen unverändert bleibt. Eine Reaktion, bei der mehr Gasmoleküle entstehen, erhöht die gesamte Stoffmenge des Gases und damit seinen Druck bei gegebener Temperatur und gegebenem Volumen:

$$p = \frac{n_{\text{total}} R T}{V}.$$

Die Drucküberschüsse betragen

$$p - p' = 0, 0.45, 6.11, 162.98 \text{ kPa}$$

bei den vier aufeinanderfolgenden Temperaturen. Der erhebliche Anstieg bei hoher Temperatur steht im Einklang mit einer thermischen Zersetzung von Ethan.

Die kleine Abweichung bei 500 K könnte auch auf nichtideales Gasverhalten oder experimentelle Fehler zurückzuführen sein. Die angegebenen Daten erlauben keine Trennung dieser Beiträge. Für die geforderten Gleichgewichtsberechnungen nehmen wir ideales Gasverhalten an und führen den Drucküberschuss bei hohen Temperaturen auf die nachstehende Reaktion zurück.

#### 4.3

Eine wahrscheinliche Reaktion ist die Dehydrierung: Ethan,  $\text{C}_2\text{H}_6$ , spaltet Wasserstoff,  $[\text{H}][\text{H}]$ , ab und bildet dabei das entsprechende Alken, Ethen,  $\text{C}_2\text{H}_4$ :



Die Gleichung erfüllt sowohl die Kohlenstoff- als auch die Wasserstoffbilanz. Jedes Mol umgesetztes Ethan liefert zwei Mol gasförmige Produkte, wodurch die Stoffmenge des Gases netto um ein Mol zunimmt. Dies erklärt den beobachteten Druckanstieg.

#### 4.4

Wir definieren den Umsatzgrad durch

$$\alpha = \frac{\text{Stoffmenge des umgesetzten Ethans}}{n_0}.$$

Ausgehend von reinem Ethan ergeben sich folgende Stoffmengen:

| Zustand          | $\text{C}_2\text{H}_6$ | $\text{C}_2\text{H}_4$ | $\text{H}_2$ |
|------------------|------------------------|------------------------|--------------|
| Zu Beginn        | $n_0$                  | 0                      | 0            |
| Im Gleichgewicht | $n_0(1 - \alpha)$      | $n_0\alpha$            | $n_0\alpha$  |

Somit gilt

$$n_{\text{total}} = n_0(1 + \alpha), \quad p = p'(1 + \alpha),$$

und

$$\alpha = \frac{p - p'}{p'}.$$

Bei 800 K gilt

$$\alpha_{800} = \frac{276.11 - 270.00}{270.00} = 0.0226296 \approx \boxed{2.26\%}.$$

Bei 1000 K gilt

$$\alpha_{1000} = \frac{500.48 - 337.50}{337.50} = 0.482904 \approx \boxed{48.3\%}.$$

Bei idealen Gasen ist jeder Partialdruck gleich der jeweiligen Stoffmenge multipliziert mit  $RT/V$ . Daher gilt

$$p_{\text{C}_2\text{H}_6} = (1 - \alpha)p' = 2p' - p,$$

$$p_{\text{C}_2\text{H}_4} = p_{\text{H}_2} = \alpha p' = p - p'.$$

Nach der Konvention des Druckquotienten gilt

$$K_p = \frac{p_{\text{C}_2\text{H}_4} p_{\text{H}_2}}{p_{\text{C}_2\text{H}_6}} = \frac{\alpha^2 p'}{1 - \alpha} = \frac{\alpha^2 p}{1 - \alpha^2} = \boxed{\frac{(p - p')^2}{2p' - p}}.$$

Die Partialdrücke betragen:

| $T$ (K) | $p_{\text{C}_2\text{H}_6}$ (kPa) | $p_{\text{C}_2\text{H}_4}$ (kPa) | $p_{\text{H}_2}$ (kPa) |
|---------|----------------------------------|----------------------------------|------------------------|
| 800     | 263.89                           | 6.11                             | 6.11                   |
| 1000    | 174.52                           | 162.98                           | 162.98                 |

Folglich gilt

$$K_{p,800} = \frac{(6.11)^2}{263.89} = 0.141468 \dots \text{ kPa} \approx \boxed{0.141 \text{ kPa}},$$

$$K_{p,1000} = \frac{(162.98)^2}{174.52} = 152.203 \dots \text{ kPa} \approx \boxed{152 \text{ kPa}}.$$

Die dimensionslose thermodynamische Gleichgewichtskonstante berücksichtigt einen Standarddruck:

$$K_{p,\text{dimensionless}} = \frac{(p_{\text{C}_2\text{H}_4}/p^\circ)(p_{\text{H}_2}/p^\circ)}{p_{\text{C}_2\text{H}_6}/p^\circ} = \frac{K_p}{p^\circ}.$$

Für  $p^\circ = 100 \text{ kPa}$  betragen ihre Werte  $1.41 \times 10^{-3}$  bzw.  $1.52$ . Beide Konventionen ergeben dasselbe Verhältnis zwischen den Werten bei den beiden Temperaturen.

#### 4.5

Das zweite Gleichheitszeichen in der abgedruckten van't-Hoff-Gleichung muss durch ein Multiplikationszeichen ersetzt werden. Die dimensionsmäßig konsistente Gleichung lautet

$$\ln \frac{K_1}{K_2} = \frac{\overline{\Delta H}}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right).$$

Mit  $T_1 = 1000 \text{ K}$  und  $T_2 = 800 \text{ K}$  ergibt sich

$$\overline{\Delta H} = \frac{R \ln(K_{p,1000}/K_{p,800})}{1/800 - 1/1000}.$$

Unter Verwendung der ungerundeten Gleichgewichtskonstanten gilt

$$\ln \frac{152.203 \dots}{0.141468 \dots} = 6.98089,$$

und

$$\frac{1}{800} - \frac{1}{1000} = 2.50 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}.$$

Daraus folgt

$$\overline{\Delta H} = \frac{(8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1})(6.98089)}{2.50 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}} = 2.32157 \times 10^5 \text{ J mol}^{-1}.$$

Somit gilt

$$\boxed{\overline{\Delta H} \approx +232 \text{ kJ mol}^{-1}}.$$

Die Reaktion ist endotherm.

#### 4.6

Eine Erhöhung der Temperatur begünstigt die endotherme Hinreaktion und erhöht daher den Gleichgewichtsumsatz von Ethan.

Eine Erhöhung des Drucks durch Kompression bei konstanter Temperatur begünstigt die Seite mit weniger Gasmolekülen. Auf der Eduktseite liegt pro stöchiometrischem Reaktionsumsatz ein Mol Gas vor, auf der Produktseite dagegen zwei; Kompression verringert daher den Umsatz.

Dies folgt auch aus

$$K_p = \frac{\alpha^2 p}{1 - \alpha^2} \implies \alpha = \sqrt{\frac{K_p}{p + K_p}}.$$

Bei konstanter Temperatur ist  $K_p$  konstant, sodass eine Erhöhung von  $p$  zu einer Abnahme von  $\alpha$  führt.

Im beschriebenen Versuch führt das Erhitzen eines starren Gefäßes dazu, dass Temperatur, Druck und Umsatz gemeinsam ansteigen; der Druck wird nicht unabhängig durch Kompression erhöht.

#### 4.7

Die Aufgabenstellung gibt nicht an, für welche Berechnung der relative Fehler gesucht ist. Unmittelbar möglich ist der Vergleich zwischen den berechneten und den gemessenen Drücken.

Mit dem gemessenen Druck als Bezugswert definieren wir den Betrag der relativen Abweichung als

$$\varepsilon_p = \frac{|p' - p|}{p} \times 100\%.$$

Falls stattdessen der Drucküberschuss bezogen auf den berechneten Druck gesucht ist, steht im Nenner  $p'$ . Für die beiden Konventionen ergibt sich:

| $T \text{ (K)}$ | $\frac{ p' - p }{p} \times 100\%$ | $\frac{ p - p' }{p'} \times 100\%$ |
|-----------------|-----------------------------------|------------------------------------|
| 300             | 0%                                | 0%                                 |
| 500             | 0.266%                            | 0.267%                             |
| 800             | 2.21%                             | 2.26%                              |
| 1000            | 32.6%                             | 48.3%                              |

Beispielsweise gilt bei 1000 K

$$\varepsilon_p = \frac{500.48 - 337.50}{500.48} \times 100\% = 32.5647 \dots \%$$

Im Rahmen des angenommenen Reaktionsmodells entspricht die letzte Spalte  $100\alpha$ . Diese Abweichungen quantifizieren das Versagen der Druckvorhersage bei unveränderter Zusammensetzung. Eine numerische Unsicherheit oder ein relativer Fehler von  $\alpha$ ,  $K_p$  oder  $\overline{\Delta H}$  lässt sich ohne Messunsicherheiten oder unabhängige Referenzwerte nicht bestimmen.

---

Die Lösung wurde mit der offiziellen Lösung abgeglichen.

## Aufgabe 5: Flüssige Verbindung X aus Steinkohlenteer

Eine bestimmte flüssige organische Verbindung **X** (die in Steinkohlenteer vorkommt) mit einer Masse von 1.06 g wurde verbrannt, wobei 0.90 g Wasser und 3.52 g Kohlenstoffdioxid entstanden. Ihre Dämpfe hatten die 3.79-fache Dichte von Stickstoff.

Die Verbindung **X** wurde mit einem heißen Gemisch aus  $\text{CrO}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4$  oxidiert. Aus dem Reaktionsgemisch wurde eine farblose kristalline Substanz **A** isoliert. Sie war in einer wässrigen Lösung von  $\text{NaOH}$  oder  $\text{NaHCO}_3$  löslich.

Die Verbindung **A** verliert beim Erhitzen Wasser und geht in die Verbindung **B** über. Die Kondensation der Verbindung **B** mit Phenol in Gegenwart von  $\text{H}_2\text{SO}_4$  oder  $\text{ZnCl}_2$  liefert eine Substanz **Y**, die sehr häufig als Säure-Base-Indikator verwendet wird.

Sowohl die Verbindung **A** als auch die Verbindung **B** ergeben beim Erhitzen mit einem Überschuss an 1-Butanol (unter Zugabe einiger Tropfen einer konzentrierten  $\text{H}_2\text{SO}_4$ -Lösung) dieselbe flüssige Verbindung **C**.

Geht man davon aus, dass ein Kohlenstoffatom in organischen Verbindungen zur Ausbildung von vier Bindungen neigt, so lassen sich formal zwei verschiedene Formeln für die Verbindung **X** aufstellen. Die auf diese Weise aufgestellten Formeln entsprechen jedoch nicht der chemischen Struktur des Moleküls **X**, denn bis heute ist es niemandem gelungen, die beiden hypothetischen Isomere herzustellen.

Haayman und Witbaut führten 1941 eine Ozonisierung der Verbindung **X** in einer  $\text{CH}_3\text{Cl}$ -Lösung durch. Nach der Hydrolyse der Ozonide wurde festgestellt, dass die wässrige Phase drei verschiedene organische Verbindungen im Stoffmengenverhältnis **D** : **E** : **F** = **3** : **2** : **1** enthält. Nur zwei davon bildeten bei milder Oxidation neue Verbindungen **G** und **H**; die dritte bleibt unter diesen Bedingungen unverändert, doch die Einwirkung stärkerer Oxidationsmittel, wie beispielsweise  $\text{H}_2\text{O}_2$ , führt zur Bildung einer wohlbekannten flüssigen Verbindung **I** mit einem charakteristischen stechenden Geruch.

Eine Probe der reinen wasserfreien Verbindung **G** wurde in einer wässrigen 1-molaren Lösung von  $\text{H}_2\text{SO}_4$  gelöst, und die erhaltene Lösung wurde mit einer 0.05-molaren  $\text{KMnO}_4$ -Maßlösung titriert. Für 0.288 g der Substanz **G** wurden  $25.6 \text{ cm}^3$  der  $\text{KMnO}_4$ -Lösung benötigt.

Aufgaben:

**5.1** Geben Sie die Summenformel der Verbindung **X** an.

**5.2** Stellen Sie anhand der Informationen und Daten in der Aufgabe die chemischen Gleichungen der Reaktionen auf, bei denen die Produkte **A**, **B** und **C** entstehen.

**5.3** Geben Sie den Namen der Verbindung **Y** an und stellen Sie die Gleichung ihrer Synthese auf. Geben Sie ihre Strukturformel und ihre Farbe sowohl in saurer als auch in basischer Lösung an.

**5.4** Geben Sie zwei formale Strukturformeln der Verbindung **X** sowie eine nach den neuesten Erkenntnissen zutreffendere Strukturformel an.

**5.5** Stellen Sie die chemische Gleichung für die Ozonolyse der Verbindung **X** auf, mit der sich erklären lässt, warum die Verbindungen **D**, **E** und **F** nach der Hydrolyse der Ozonide in der wässrigen Phase im Stoffmengenverhältnis 3 : 2 : 1 vorliegen.

**5.6** Stellen Sie die chemischen Gleichungen der Reaktionen zur Bildung der Verbindungen **G**, **H** und **I** auf.

**5.7** Geben Sie sowohl die beiden früher verwendeten formalen Strukturformeln als auch die zutreffendere moderne Strukturformel einer weiteren flüssigen organischen Verbindung an, von der bekannt ist, dass sie ebenfalls in Steinkohlenteer vorkommt und ein Derivat der Verbindung **X** ist. Mit dem Namen welches bekannten Chemikers ist die Formel dieser Grundverbindung historisch verbunden? Welche Produkte werden bei ihrer Ozonolyse erhalten?

**5.8** Schreiben Sie die Namen der Substanzen **X**, **Y**, **A** – **I** unter die entsprechenden Verbindungen in den Gleichungen.

Hinweis:

Verwenden Sie bei Ihrer Berechnung:

$$M(\text{C}) = 12 \text{ g mol}^{-1}; \quad M(\text{O}) = 16 \text{ g mol}^{-1}; \quad M(\text{H}) = 1 \text{ g mol}^{-1}; \quad M(\text{KMnO}_4) = 158 \text{ g mol}^{-1}.$$

Aufgabentext aus dem offiziellen englischen Text übersetzt.

## Antworten

- **5.1**  $\text{C}_8\text{H}_{10}$ . **X** ist ***o*-Xylol**, auch 1,2-Dimethylbenzol genannt.
- **5.2** Die Oxidation liefert **A, Phthalsäure**; die Wasserabspaltung liefert **B, Phthalsäureanhydrid**. Die Veresterung einer der beiden Verbindungen mit überschüssigem 1-Butanol liefert **C, Di-*n*-butylphthalat**.
- **5.3** **Y ist Phenolphthalein**, das aus einem Molekül B und zwei Molekülen Phenol unter Abspaltung eines Moleküls Wasser entsteht. Sein neutrales Lacton ist **farblos**; sein chinoides Dianion ist im üblichen basischen Indikatorbereich **rosa/magentafarben**.
- **5.4** Bei Methylgruppen an den Ringpositionen 1 und 2 weisen die beiden formalen Kekulé-Strukturen Doppelbindungen an  $1 = 2, 3 = 4, 5 = 6$  bzw.  $2 = 3, 4 = 5, 6 = 1$  auf. Das tatsächliche Molekül besitzt einen delokalisierten aromatischen Ring.
- **5.5** **D = Glyoxal, E = Methylglyoxal, F = Diacetyl**. Die beiden formalen Spaltungsmuster liefern  $D + 2E$  und  $2D + F$ ; bei gleichen Beiträgen ergibt sich  $D : E : F = 3 : 2 : 1$ .
- **5.6** **G = Oxalsäure, H = Brenztraubensäure, I = Essigsäure**. Milde Oxidation wandelt D in G und E in H um; die Peroxidsplattung von F liefert zwei Moleküle I. Die Titration bestätigt wasserfreie Oxalsäure,  $M = 90 \text{ g mol}^{-1}$ .
- **5.7** Die gemeinte Stammverbindung ist **Benzol**, c1ccccc1, historisch mit **August Kekulé** verbunden. Seine zu Carbonylverbindungen führende Ozonolyse liefert drei Moleküle Glyoxal pro Molekül Benzol. Die Formulierung zur Derivatbeziehung ist vertauscht.
- **5.8** Die vollständige Zuordnung lautet:

| Bezeichnung | Name                                  | SMILES                                                 |
|-------------|---------------------------------------|--------------------------------------------------------|
| <b>X</b>    | <i>o</i> -Xylol; 1,2-Dimethylbenzol   | <chem>Cc1ccccc1C</chem>                                |
| <b>Y</b>    | Phenolphthalein, neutrales Lacton     | <chem>O=C1OC(c2ccc(O)cc2)(c2ccc(O)cc2)c2ccccc21</chem> |
| <b>A</b>    | Phthalsäure; Benzol-1,2-dicarbonsäure | <chem>O=C(O)c1ccccc1C(=O)O</chem>                      |
| <b>B</b>    | Phthalsäureanhydrid                   | <chem>O=C1OC(=O)c2ccccc21</chem>                       |
| <b>C</b>    | Di- <i>n</i> -butylphthalat           | <chem>CCCCOC(=O)c1ccccc1C(=O)OCCCC</chem>              |
| <b>D</b>    | Glyoxal; Ethandial                    | <chem>O=CC=O</chem>                                    |
| <b>E</b>    | Methylglyoxal; 2-Oxopropanal          | <chem>CC(=O)C=O</chem>                                 |
| <b>F</b>    | Diacetyl; Butan-2,3-dion              | <chem>CC(=O)C(=O)C</chem>                              |
| <b>G</b>    | Oxalsäure; Ethandisäure               | <chem>O=C(O)C(=O)O</chem>                              |
| <b>H</b>    | Brenztraubensäure; 2-Oxopropansäure   | <chem>CC(=O)C(=O)O</chem>                              |
| <b>I</b>    | Essigsäure; Ethansäure                | <chem>CC(=O)O</chem>                                   |

## Lösung

### 5.1 — Summenformel von X

Aus den Verbrennungsprodukten ergeben sich die Stoffmengen von Kohlenstoff und Wasserstoff:

$$n(\text{C}) = n(\text{CO}_2) = \frac{3.52 \text{ g}}{44 \text{ g mol}^{-1}} = 0.0800 \text{ mol},$$
$$n(\text{H}) = 2n(\text{H}_2\text{O}) = 2 \frac{0.90 \text{ g}}{18 \text{ g mol}^{-1}} = 0.100 \text{ mol}.$$

Die entsprechenden Massen betragen unter Beibehaltung der Stellen in den Zwischenergebnissen

$$m(\text{C}) = 0.960 \text{ g}, \quad m(\text{H}) = 0.100 \text{ g}.$$

Ihre Summe entspricht der Probenmasse von 1.060 g. Die Analyse erfasst die Probe somit vollständig als Kohlenstoff und Wasserstoff.

Das Atomzahlenverhältnis beträgt

$$n(\text{C}) : n(\text{H}) = 0.0800 : 0.100 = 4 : 5,$$

also lautet die Verhältnisformel  $\text{C}_4\text{H}_5$ , mit der zugehörigen molaren Masse

$$4(12) + 5(1) = 53 \text{ g mol}^{-1}.$$

Bei gleicher Temperatur und gleichem Druck sind Gasdichten proportional zu den molaren Massen. Mit  $M(\text{N}_2) = 28 \text{ g mol}^{-1}$  gilt

$$M(\text{X}) = 3.79(28) = 106.12 \text{ g mol}^{-1} \approx 106 \text{ g mol}^{-1}.$$

Folglich gilt

$$\frac{M(\text{X})}{M(\text{C}_4\text{H}_5)} \approx \frac{106}{53} = 2, \quad \boxed{X = \text{C}_8\text{H}_{10}}.$$

Der Ungesättigtheitsgrad beträgt

$$\frac{2(8) + 2 - 10}{2} = 4,$$

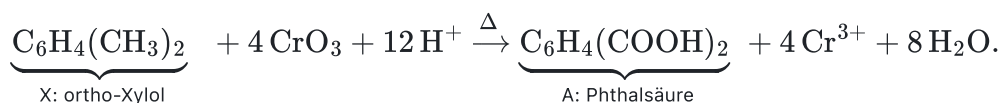
was mit einem Benzolring vereinbar ist.

### 5.2 — Identifizierung und Bildung von A, B und C

Die Löslichkeit in wässriger Hydrogencarbonatlösung weist auf eine saure Verbindung hin, hier eine Carbonsäure. Die Bildung eines Anhydrids beim Erhitzen mit anschließender Kondensation mit Phenol zu einem Indikator identifiziert das Paar **Phthalsäure–Phthalsäureanhydrid**.

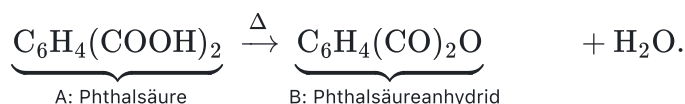
Phthalsäure besitzt benachbarte Carboxylgruppen und bildet leicht ein fünfgliedriges cyclisches Anhydrid. Daher muss X benachbarte Methylgruppen besitzen: Es handelt sich um **o-Xylol**. Chrom(VI) oxidiert in der Hitze jede Methylgruppe zu einer Carboxylgruppe.

Eine vollständig ausgeglichene Gleichung in saurer Lösung lautet



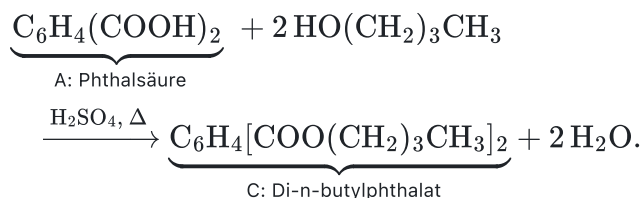
Die beiden Substituenten in diesen verkürzten aromatischen Strukturformeln besetzen benachbarte Ringpositionen.

Beim Erhitzen von A wird Wasser abgespalten:

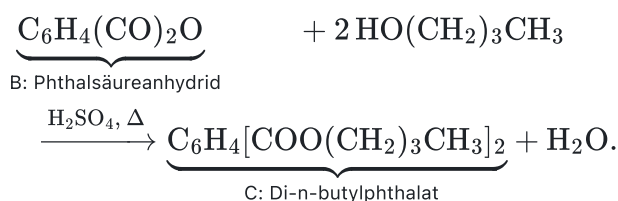


In B schließt das Sauerstoffatom zwischen den beiden Acylgruppen den fünfgliedrigen Anhydridring, der mit dem Benzolring kondensiert ist.

Überschüssiges **Butan-1-ol**, CCCCO, verestert beide Carboxylgruppen von A:

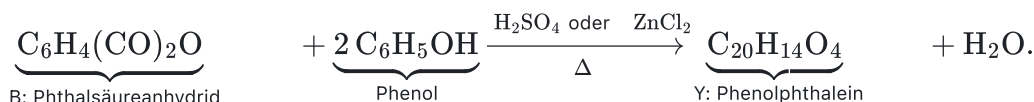


Ausgehend von B entsteht derselbe Diester, jedoch wird netto nur ein Molekül Wasser gebildet:



### 5.3 — Phenolphthalein: Synthese, Strukturen und Farben

Phthalsäureanhydrid kondensiert mit zwei Molekülen **Phenol**, Oc1ccccc1, zu **Phenolphthalein**:



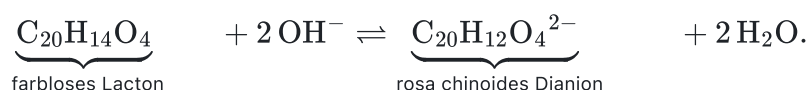
Die relevanten Strukturen sind:

| Medium                             | Form, Name und Farbe                                         | SMILES                                                         |
|------------------------------------|--------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------|
| Sauer                              | Neutrales Phenolphthalein-Lacton; <b>farblos</b>             | <chem>O=C1OC(c2ccc(O)cc2)(c2ccc(O)cc2)c2ccccc21</chem>         |
| Basisch, üblicher Indikatorbereich | Chinoides Phenolphthalein-Dianion; <b>rosa/magentafarben</b> | <chem>O=C([O-])c1ccccc1C(c1ccc([O-])cc1)=C1C=CC(=O)C=C1</chem> |

Um die Struktur in saurer Lösung zu zeichnen, zeichnet man einen Phthalidring, dessen tetraedrisches Kohlenstoffatom zwei **para-Hydroxyphenyl**-Gruppen trägt.

Für die Struktur in basischer Lösung öffnet man den Lactonring unter Bildung einer **ortho-Carboxylat**-Gruppe. In der dargestellten mesomeren Grenzstruktur ist das zentrale Kohlenstoffatom über eine Doppelbindung mit einem chinoiden Ring und über eine Einfachbindung mit einem para-Phenoxidring verbunden. Ladung und Konjugation sind delokalisiert; der einzelne SMILES-Ausdruck stellt eine Grenzstruktur dar.

Die gesamte Säure-Base-Umwandlung lautet



Die Ringöffnung und die dadurch entstehende erweiterte Konjugation erklären die sichtbare Farbe. Die angegebene Farbe im Basischen bezieht sich auf den normalen Indikatorbereich; in sehr stark alkalischen Lösungen können weitere Veränderungen auftreten.

## 5.4 — Zwei formale Strukturen und die aromatische Struktur von X

Man nummeriert die Ringkohlenstoffatome fortlaufend von 1 bis 6, wobei die Methylgruppen an den Positionen 1 und 2 sitzen.

| Darstellung von <i>o</i> -Xylol     | Doppelbindungen im Ring                       | SMILES                       |
|-------------------------------------|-----------------------------------------------|------------------------------|
| Kekulé-Grenzstruktur $K_1$          | 1 = 2, 3 = 4, 5 = 6                           | <chem>CC1=C(C)C=CC=C1</chem> |
| Kekulé-Grenzstruktur $K_2$          | 2 = 3, 4 = 5, 6 = 1                           | <chem>CC1C(C)=CC=CC=1</chem> |
| Delokalisierte aromatische Struktur | Keine festgelegte alternierende Lokalisierung | <chem>Cc1ccccc1C</chem>      |

In  $K_1$  sind die beiden methylgruppentragenden Ringkohlenstoffatome durch eine formale Doppelbindung miteinander verbunden; in  $K_2$  durch eine formale Einfachbindung.

Für die moderne Darstellung zeichnet man ein Sechseck mit einem Kreis im Inneren und Methylgruppen an zwei benachbarten Ecken. Der aromatische Ring ist annähernd planar und besitzt sechs delokalisierte  $\pi$ -Elektronen.

Die Kekulé-Darstellungen sind **mesomere Grenzstrukturen, keine getrennt existierenden Isomere oder im Gleichgewicht stehenden Moleküle**. Ihre SMILES-Ausdrücke können daher von chemischer Software in dieselbe aromatische Struktur umgewandelt werden.

## 5.5 — Ozonolyse und das Verhältnis 3 : 2 : 1

Bei der formalen ozonolytischen Spaltung wird jedes Kohlenstoffatom einer lokalisierten Doppelbindung in ein Carbonylkohlenstoffatom umgewandelt:

- Ein Ringkohlenstoffatom, das Wasserstoff trägt, wird zu einem Aldehydcarbonylkohlenstoffatom.
- Ein Ringkohlenstoffatom, das eine Methylgruppe trägt, wird zu einem Ketoncarbonylkohlenstoffatom.

Die Spaltung der drei formalen Doppelbindungen hinterlässt drei Fragmente mit jeweils zwei Kohlenstoffatomen, die den drei verbleibenden Ringbindungen entsprechen.

| Formales Muster                             | Verbleibende Kohlenstoffpaare | Organische Produkte                                     |
|---------------------------------------------|-------------------------------|---------------------------------------------------------|
| $K_1$ : Spaltung von<br>1 = 2, 3 = 4, 5 = 6 | 2–3, 4–5, 6–1                 | Ein Molekül Glyoxal D und zwei Moleküle Methylglyoxal E |
| $K_2$ : Spaltung von<br>2 = 3, 4 = 5, 6 = 1 | 1–2, 3–4, 5–6                 | Ein Molekül Diacetyl F und zwei Moleküle Glyoxal D      |

Je eine Anwendung der beiden formalen Spaltungsmuster ergibt somit

$$(D + 2E) + (2D + F) = 3D + 2E + F.$$

Damit wird das beobachtete Verhältnis wiedergegeben:

$$\boxed{D : E : F = 3 : 2 : 1}.$$

Unter Verwendung der üblichen formalen Bilanz für die Ozonidhydrolyse mit Wasserstoffperoxid als Nebenprodukt lautet die zusammengefasste Gleichung



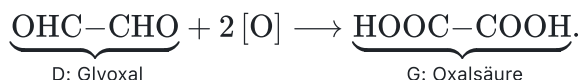
Das Lösungsmittel ist **Chlormethan**,  $\text{CCl}_4$ . Die Carbonylprodukte sind in ihren üblichen nicht hydratisierten Formen angegeben.

Dies ist eine formale Spaltungsbilanz für das vorgegebene anfängliche Produktgemisch. Sie bedeutet weder, dass X zwei unabhängig existierende Kekulé-Isomere enthält, noch legt die Mesomerie allein die quantitativen Anteile der Reaktionswege fest.

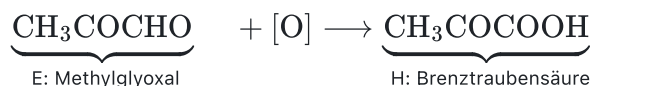
### 5.6 — Bildung von G, H und I; Überprüfung durch Titration

Hier bezeichnet  $[\text{O}]$  ein von einem Oxidationsmittel bereitgestelltes Sauerstoffäquivalent und kein freies Sauerstoffatom als Zwischenprodukt.

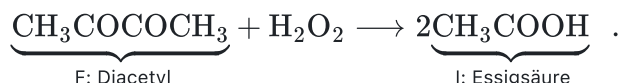
Milde Oxidation wandelt beide Aldehydgruppen des Glyoxals in Carboxylgruppen um:



Methylglyoxal besitzt eine Aldehydgruppe und eine Ketogruppe. Die Oxidation der Aldehydgruppe liefert Brenztraubensäure:

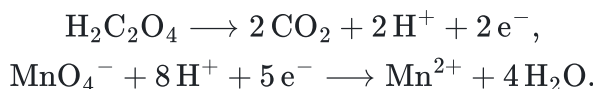


Diacetyl besitzt zwei Ketogruppen und keine Aldehydgruppe, was seine Beständigkeit gegenüber der vorgegebenen milden Oxidation erklärt. Wasserstoffperoxid spaltet die Bindung zwischen seinen Carbonylkohlenstoffatomen:

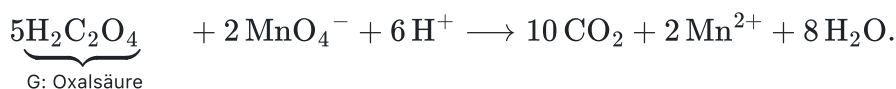


Essigsäure ist die bekannte Flüssigkeit mit stechendem, essigartigem Geruch.

Die Titration überprüft die Zuordnung von G unabhängig. Die relevanten Teilreaktionen lauten



Ihre Kombination ergibt



Die Stoffmenge an Permanganat beträgt

$$n(\text{MnO}_4^-) = 0.05 \text{ mol L}^{-1} \times 25.6 \times 10^{-3} \text{ L} = 1.28 \times 10^{-3} \text{ mol}.$$

Aus der 5 : 2-Stöchiometrie folgt

$$n(\text{G}) = \frac{5}{2} n(\text{MnO}_4^-) = 3.20 \times 10^{-3} \text{ mol}.$$

Somit ergibt sich die molare Masse zu

$$M(\text{G}) = \frac{0.288 \text{ g}}{3.20 \times 10^{-3} \text{ mol}} = 90 \text{ g mol}^{-1}.$$

Für wasserfreie Oxalsäure gilt

$$M(\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4) = 2(1) + 2(12) + 4(16) = 90 \text{ g mol}^{-1},$$

was genau mit den Titrationsdaten übereinstimmt.

## 5.7 — Benzol, Kekulé-Strukturen und Ozonolyse

Die gemeinte Grund- oder Stammverbindung ist **Benzol**. Genauer gesagt ist *o*-Xylol ein Dimethylderivat des Benzols.

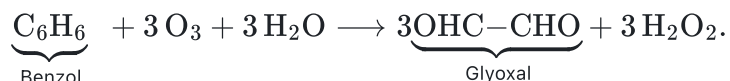
Bei festgelegter Nummerierung entlang eines sechsgliedrigen Rings:

| Benzoldarstellung           | Doppelbindungen im Ring                | SMILES                   |
|-----------------------------|----------------------------------------|--------------------------|
| Erste Kekulé-Grenzstruktur  | 1 = 2, 3 = 4, 5 = 6                    | <chem>C1=CC=CC=C1</chem> |
| Zweite Kekulé-Grenzstruktur | 2 = 3, 4 = 5, 6 = 1                    | <chem>C1C=CC=CC=1</chem> |
| Aromatische Struktur        | Sechs delokalisierte $\pi$ -Elektronen | <chem>c1ccccc1</chem>    |

Die entsprechenden Zeichnungen sind zwei Sechsecke mit alternierenden, um eine Kante gegeneinander verschobenen Doppelbindungen sowie ein modernes Sechseck mit einem Kreis im Inneren. Jedes Ringkohlenstoffatom trägt ein Wasserstoffatom. Benzol ist planar, und alle sechs Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen sind gleichwertig.

Der historisch damit verbundene Chemiker ist **August Kekulé**.

Da jedes Ringkohlenstoffatom Wasserstoff trägt, entsteht bei beiden formalen Spaltungsmustern ausschließlich Glyoxal als organisches Carbonylprodukt. Die übliche Hydrolysebilanz lautet



Ein Molekül Benzol liefert somit bei der hier betrachteten, zu Carbonylverbindungen führenden Aufarbeitung **drei Moleküle Glyoxal**.

## 5.8 — Namen unter den Formeln und übrige SMILES-Ausdrücke

Die Namen von X, Y und A–I stehen in den obigen Gleichungen unter ihren Formeln; die vollständige Zuordnung von Namen und SMILES ist in Antworten 5.8 angegeben.

Der Vollständigkeit halber sind die übrigen in der Lösung verwendeten molekularen und ionischen Spezies aufgeführt:

| Spezies                 | SMILES                               |
|-------------------------|--------------------------------------|
| Wasser                  | <chem>O</chem>                       |
| Kohlenstoffdioxid       | <chem>O=C=O</chem>                   |
| Distickstoff            | <chem>N#N</chem>                     |
| Ozon                    | <chem>[O-][O+]=O</chem>              |
| Wasserstoffperoxid      | <chem>OO</chem>                      |
| Schwefelsäure           | <chem>OS(=O)(=O)O</chem>             |
| Chrom(VI)-oxid          | <chem>O=[Cr](=O)=O</chem>            |
| Chrom(III)-Ion          | <chem>[Cr+3]</chem>                  |
| Wasserstoffion          | <chem>[H+]</chem>                    |
| Hydroxidion             | <chem>[OH-]</chem>                   |
| Natriumhydroxid         | <chem>[Na+].[OH-]</chem>             |
| Natriumhydrogencarbonat | <chem>[Na+].OC(=O)[O-]</chem>        |
| Zinkchlorid             | <chem>[Zn+2].[Cl-].[Cl-]</chem>      |
| Kaliumpermanganat       | <chem>[K+].[O-][Mn](=O)(=O)=O</chem> |

| Spezies        | SMILES                          |
|----------------|---------------------------------|
| Permanganation | <chem>[O-][Mn](=O)(=O)=O</chem> |
| Mangan(II)-Ion | <chem>[Mn+2]</chem>             |

Die durch Punkte getrennten Salz-SMILES geben die ionische Zusammensetzung an; sie legen weder die Solvation noch die Koordination im Festkörper fest.

---

Die Lösung wurde mit der offiziellen Lösung abgeglichen. Wo diese Lösung von der offiziellen Lösung abweicht, enthält die offizielle Lösung einen Fehler oder Druckfehler.