

# 1 Material und Organisatorisches

Das gesammelte Material finden Sie auf Wuecampus2 (Schlüssel: CHVK19):

- <https://wuecampus2.uni-wuerzburg.de/moodle/course/view.php?id=34681>



## 1.1 Zeitplan

Die Vorlesungstermine finden in Hörsaal A und B statt, ansonsten in HS A, D und E für die Übungen

- Montag
  - 10.00 - 12.00 Uhr, Vorlesung in HS A
  - 13.00 - 15.00 Uhr, Vorlesung in HS A
- Dienstag
  - 10.00 - 12.00 Uhr, Vorlesung in HS A
  - 13.00 - 15.00 Uhr, Übung → die Aufgaben finden Sie auf Wuecampus2, HS B, D u. E
- Mittwoch
  - 10.00 - 12.00 Uhr, Übung HS B, D u. E
  - 13.00 - 15.00 Uhr, Vorlesung in HS A

## 2 Atombau und Periodensystem der Elemente

Demokrit erkannte schon (ca. 400 v.Chr.) das feste, unteilbare Teilchen die Materie bilden. John Dalton (1803 n. Chr.) gleicher Grundgedanke + Alle Atome eines Elements sind einander gleich (Masse, Gestalt). Atome verschiedener Elemente besitzen verschiedene Eigenschaften, chemische Verbindungen entstehen durch chemische Reaktionen von Atomen verschiedener Elemente.

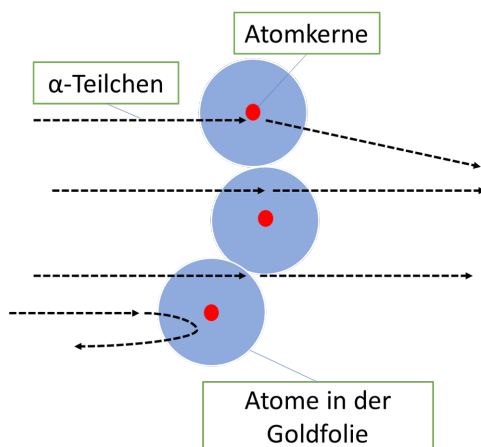


Abbildung 2.1: Streuung von  $\alpha$ -Strahlung an Goldfolie

Rutherford konnte zu Beginn des 20 Jhd. zeigen, dass Materie keine gleichmäßige Masseverteilung aufweist. Es ist viel Platz zwischen den Atomkernen.

### 2.1 Grundlagen elektromagnetische Strahlung

Das Spektrum der elektromagnetischen Strahlung umfasst noch vielmehr als nur den sichtbaren Bereich.

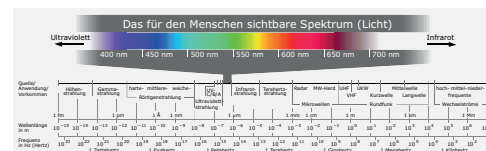


Abbildung 2.2: Elektromagnetisches Spektrum, Horst Frank, Jailbird and Phrood @ CC BY-SA 3.0 DE

die Intensität einer Strahlung ist proportional zur Amplitude  $A^2$ . die Ausbreitungsgeschwindigkeit für EM Wellen ist

von der Wellenlänge unabhängig. Diese wird als Lichtgeschwindigkeit bezeichnet. Die Frequenz ist gleich der Zahl der Wellen, die an einem gegebenen Ort in jeder Sekunde vorbeikommen. Die SI-Einheit für die Frequenz ist das Hertz ( $1\text{ Hz} = \frac{1}{\text{s}}$ ). Zwischen der Wellenlänge, der Lichtgeschwindigkeit und der Frequenz besteht folgender Zusammenhang:  $c = \lambda \cdot \nu$ .

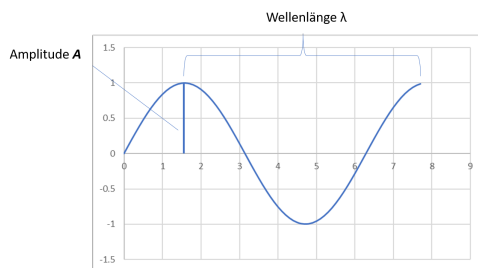


Abbildung 2.3: EM-Charakteristika

### 2.1.1 Photoelektrischer Effekt

EM-Strahlung kann auch als Teilchenstrom verstanden werden. Auftreten von Energieportionen Quanten (für Licht: Photonen /siehe Versuch 'Photoelektrischer Effekt') kann mit folgender Formel beschrieben werden:  $E = h \cdot \nu$ . Dieser Versuch zeigte schon, dass elektromagnetische Strahlung sowohl als Welle wie als auch Teilchen beschrieben werden kann.

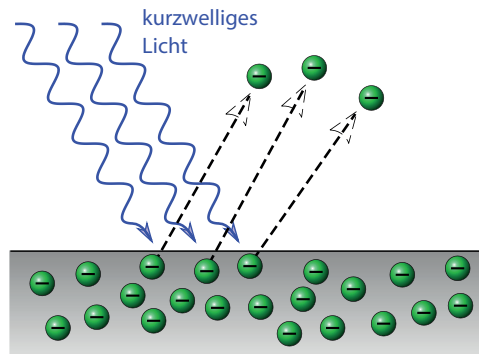


Abbildung 2.4: Darstellung Photoelektrischer Effekt

### 2.1.2 Dispersion

Versuch mit Prisma zeigt sehr schön die Abhängigkeit der Ablenkung von Licht von der Wellenlänge  $\lambda$ . Je kleiner  $\lambda$  desto größer ist die Ablenkung.

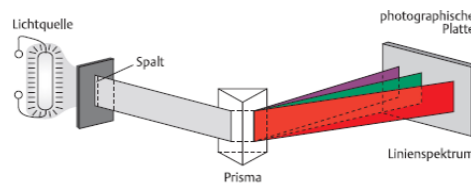


Abbildung 2.5: Erzeugung eines Linienspektrums, Mortimer, 2014, S.75

### 2.2 Spektrum von Wasserstoff

Das Atomspektrum von Wasserstoff im sichtbaren Bereich ist auch ein Linienspektrum.

Jede dieser Linien entspricht einer Ener-



Abbildung 2.6: Spektrum des Wasserstoffatoms im sichtbaren Bereich (Balmer Serie), Jan Homann @ CC BY-SA 3.0 DE

Übergänge beschreiben zu können, kann man wie folgt vorgehen.

### 2.2.1 mathematische Beschreibung der elektronischen Übergänge im Wasserstoff

gie für einen elektronischen Übergang. Das sagt etwas aus über die Struktur der Elektronenhülle. Bisher gab es noch keine genaue Vorstellung. Das Bohrsche Atommodell liefert hier ein gutes erstes Modell.

Durch gleichsetzen der wirkenden Kräfte, Elektrostatik und Zentrifugalkraft, konnte Bohr die Energie  $E_n$  berechnen.

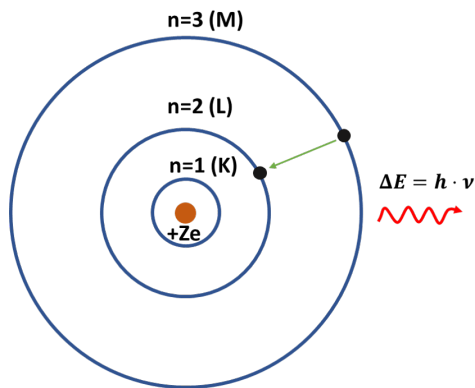


Abbildung 2.7: Bahngrößen nach dem Bohrschen Atommodell und Elektronische Übergänge

Nach Bohr gibt es keine beliebigen Bahnen für Elektronen um den Kern sondern bestimmte Kreisbahnen (Bohr-Radien). Der Bahndrehimpuls des Elektrons ( $m \cdot v \cdot r$ ) ist ein ganzzahliges Vielfaches des Bahndrehimpulses ( $m \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$ ). Um die

$$F_{pot} = F_{zentrif}$$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

Multiplikation mit r

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} = mv^2$$

$$\rightarrow -E_{pot} = 2 \cdot E_{kin}$$

Multiplikation mit  $mr^2$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot mr = m^2 v^2 r^2$$

Ausnutzen der Drehimpulsquantelung

$$mvr = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot mr = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2}$$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 h^2}{m e^2 4\pi^2}$$

mit  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  ergibt sich:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{m e^2}$$

der Bohrradius für  $n = 1$  beträgt 52,9 pm. Die Energie  $E_n$  setzt sich aus  $E_{pot} + E_{kin}$  zusammen  $E_{pot} = 2E_{kin}$

$$E_n = -\frac{1}{2} \cdot \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \right)$$

jetzt noch r einsetzen, mit  $r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{m e^2}$

$$E_n = -\left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{n^2} E_R$$

mit  $E_R = -\left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m}{2\hbar^2} = 13.6 eV$

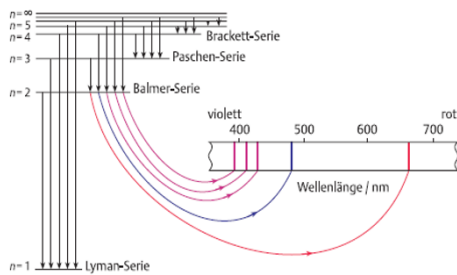


Abbildung 2.8: Zusammenhang zwischen den Elektronenübergängen im Wasserstoff-Atom und den Linien im Spektrum, Mortimer, 2014, S. 77

## 2.3 Welle-Teilchen-Dualismus

Einstein und Planck konnten den Teilchencharakter von Elektronen und Photonen

zeigen, De Broglie den Wellencharakter von Elektronen. Die Beziehung aus dem Photoelektrischen Effekt zwischen Energie Plankschem Wirkungsquantum und der Frequenz ist schon bekannt ( $E = h \cdot \nu$ ). Die Frequenz kann wie folgt ersetzt werden:

$$E = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

Für die Energie können wir Einsteins Beziehung benutzen:

$$E = m c^2$$

Dann kann durch Einsetzen folgendes erhalten werden:  $m \cdot c^2 = h \cdot \frac{c}{\lambda}$  De Broglie konnte zeigen, dass jedem bewegten (nicht nur mit Lichtgeschwindigkeit bewegtem) Teilchen eine Wellenlänge zugeordnet werden kann ...und dann...

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot \nu}$$

## 2.4 Heisenbergsche Unschärferelation

Als Schlussfolgerung aus dem Welle-Teilchen-Dualismus ergab sich die Unschärferelation von Heisenberg (1927). Bspw. sind Aufenthaltsort und Impuls eines Elektrons gleichzeitig nicht exakt bestimmbar. Elektronen sind vielmehr nicht auf 'Bahnen'

unterwegs es sind vielmehr Elektronenwolken, Aufenthaltswahrscheinlichkeiten. Für das Pärchen Ort/Impuls gilt:

$$\Delta x \cdot \Delta(m \cdot v) \geq \frac{\hbar}{2}$$

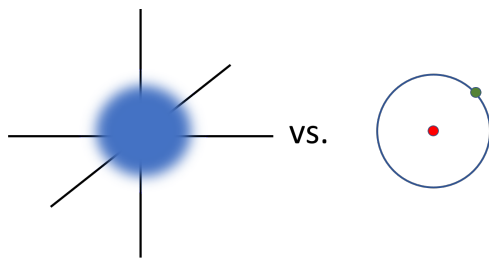


Abbildung 2.9: 1s Elektron

## 2.5 Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung (SGL) ist eine Eigenwertgleichung, wobei die mathematischen Lösungen Wellenfunktionen sind.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion ist als Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte definiert. Die Aufenthaltsbereiche der Elektronen sind gleich den Orbitalen.

## 2.6 Quantenzahlen

Durch Lösen der SGL für das Wasserstoffatom werden Schwingungszustände, Ladungsverteilung und Energien erhalten.

Die erlaubten Zustände sind durch die Quantenzahlen beschrieben: Hauptquantenzahl  $n$ , Nebenquantenzahl  $l$ , magnetische Quantenzahl  $m_l$  und Spinquantenzahl  $m_s$ .

### 2.6.1 Hauptquantenzahl $n$

Die Hauptquantenzahl beschreibt die möglichen Energieniveaus des Elektrons im Atom, wobei  $n$  alle ganzzahligen positiven Werte von 1 bis unendlich annehmen kann. Die Energieniveaus sind gleichbedeutend mit den Schalen (K,L,M,N,...).

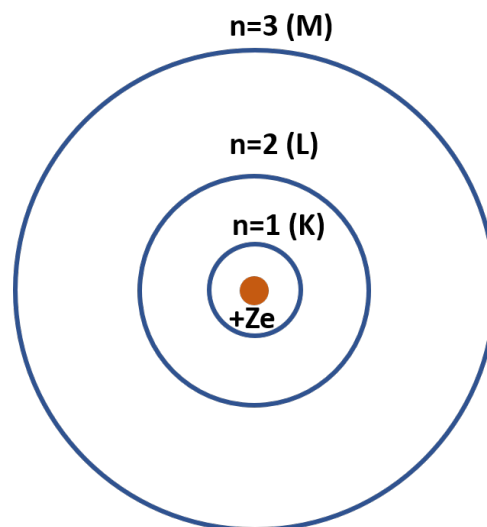


Abbildung 2.10: Schalenmodell

### 2.6.2 Nebenquantenzahl $l$

Jede Schale kann in  $n$  Unterschalen aufgeteilt werden. Die Nebenquantenzahl  $l$  und die Hauptquantenzahl  $n$  sind über

die Beziehung  $l \leq n - 1$  verknüpft. Es können die Werte: 1, 2, 3, ...,  $n - 1$  angenommen werden. Die energetische Aufteilung und räumliche Form der Orbitale wird hierdurch beschrieben. Die Bezeichnungen für diese sind:  $s(l = 1)$ ,  $p(l = 2)$ ,  $d(l = 3)$ ,  $f(l = 4)$ , ... Die Anzahl der Orbitale ist gegeben durch:  $2l + 1$ .

### 2.6.3 magnetische Quantenzahl $m$

Die magnetische Quantenzahl dient zur Unterscheidung der Orbitale, wobei  $m_l$  Werte von  $-l$  bis  $+l$  annehmen kann. Diese genauere Beschreibung bezieht sich auf die Anzahl an Niveaus und die Richtungsinformation der Orbitale bzw. deren Orientierung.

### 2.6.4 Spinquantenzahl

Die Spinquantenzahl gibt den Eigendrehimpuls des Elektrons an:  $m_s = +\frac{1}{2}$  oder  $m_s = -\frac{1}{2}$

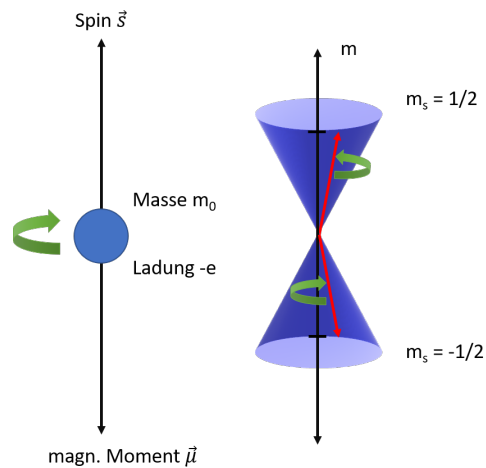


Abbildung 2.11: Der Spin kann als Rotation des Elektrons (punktförmig) um die eigene Achse aufgefasst werden (links). Im Magnetfeld kann sich das Elektron ausrichten (rechts). Das Drehmoment bewirkt dann eine Präzessionsbewegung.

Schale	n	l	Orbitaltyp	$m_l$	Anz. Orb. (2l+1)	$m_s$	Anz. Quantenzust.
K	1	0	1s	0	1	$\pm \frac{1}{2}$	2
L	2	0	2s	0	1	$\pm \frac{1}{2}$	2
L	2	1	2p	-1,0,+1	3	$\pm \frac{1}{2}$	6
M	3	0	3s	0	1	$\pm \frac{1}{2}$	2
M	3	1	3p	-1,0,+1	3	$\pm \frac{1}{2}$	6
M	3	2	3d	-2,-1,0,+1,+2	5	$\pm \frac{1}{2}$	10

Tabelle 2.1: Quantenzustände des Wasserstoffatoms bis n=3



## 2.7 Atomorbitale

Die Quantenzahlen charakterisieren die Quantenzustände, die man als Orbitale bezeichnet. Es handelt sich hierbei um den Bereich der größten Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen (>95%).

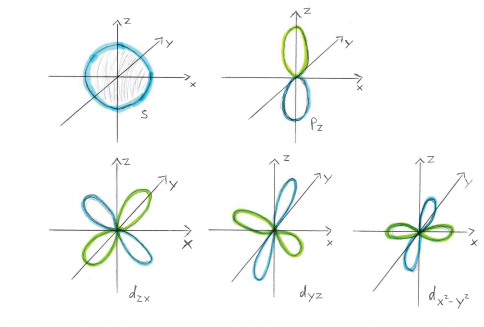


Abbildung 2.12: s-, p- und d-Orbital(e) (1)

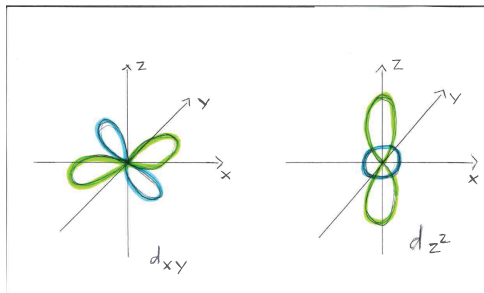


Abbildung 2.13: s-, p- und d-Orbital(e) (2)

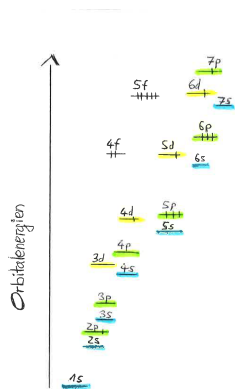
Die Form und Gestalt der Atomorbitale von Mehrelektronensystemen stimmen weitgehend mit den Lösungen für Wasserstoff und den daraus resultierenden Orbitalen überein. Nicht alle Orbitale einer

Schale haben die gleiche Energie, was für die Besetzung mit Elektronen wichtig ist. Hingegen sind Orbitale des gleichen Typs energetisch entartet, das heißt sie sind energetisch gleichwertig.

### 2.7.1 Besetzung der Orbitale

Es gibt vier Prinzipien/Regeln für die Besetzung; **Das Energieprinzip** sagt aus, dass die Orbitale nach der energetischen Reihenfolge beginnend mit dem energetisch niedrigsten besetzt werden. Die **Hundsche Regel** gibt vor, dass die Orbitale zunächst einfach mit parallelem Spin besetzt werden. Laut des **Pauli Prinzips** werden die einzelnen Orbitale dann paarweise mit antiparallelem Spin besetzt, da sich die Quantenzahlen mindestens in einer unterscheiden müssen. **Halb- und vollbesetzte** Unterschalen sind energetisch stabiler. Eine Unterschale, bei der jedes Orbital einfach besetzt ist, wird als halbbesetzt bezeichnet.

Für **Cu** mit  $Z = 29$  erwartet man folgende Besetzung:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9 4s^2$  man findet aber:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$  → größere Stabilität der vollbesetzten 3d Unterschale Bsp. **Cr**, hier findet man:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$  → größere Stabilität der halbbesetzten Unterschale;



wurden Vorhersagen möglich. 1897 führte Rydberg Ordnungszahlen  $Z$  zur fortlaufenden Nummerierung ein.

Abbildung 2.14: Energetische Abfolge der Orbitale

### 2.7.2 Edelgaskonfiguration

Die Elektronenkonfiguration der Edelgase ist von großer Bedeutung, da besonders stabil. Hier handelt es sich um vollbesetzte Unterschalen mit der generellen Konfiguration von  $ns^2np^6$ . Neon besitzt bspw. die Konfiguration:  $1s^22s^22p^6$ . Die Edelgase besitzen geringe bis keine chemische Reaktivität.

## 2.8 Das Periodensystem der Elemente

Dimitrij Mendelejew und Lothar Meyer ordneten die damals bekannten Elemente nach Masse (1869). Das Ordnungsschema in dem Elemente mit ähnlichen chemischen Eigenschaften periodisch auftreten hatte besonders Mendelejew erkannt. Es

1													2													13													14													15													16													17													18																																																																																																																																														
1 <b>H</b> hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]													2 <b>He</b> helium 4.0026													3 <b>Li</b> lithium 6.94 [6.938, 6.997]													4 <b>Be</b> beryllium 9.0122													5 <b>B</b> boron 10.81 [10.806, 10.821]													6 <b>C</b> carbon 12.011 [12.009, 12.012]													7 <b>N</b> nitrogen 14.007 [14.006, 14.008]													8 <b>O</b> oxygen 15.999 [15.999, 16.000]													9 <b>F</b> fluorine 18.998													10 <b>Ne</b> neon 20.180																																																																																																																				
11 <b>Na</b> sodium 22.990													12 <b>Mg</b> magnesium 24.305 [24.304, 24.307]													13 <b>Al</b> aluminium 26.982													14 <b>Si</b> silicon 28.086 [28.084, 28.088]													15 <b>P</b> phosphorus 30.974													16 <b>S</b> sulfur 32.06 [32.059, 32.078]													17 <b>Cl</b> chlorine 35.45 [35.446, 35.457]													18 <b>Ar</b> argon 39.95 [39.792, 39.963]																																																																																																																																														
19 <b>K</b> potassium 39.098													20 <b>Ca</b> calcium 40.078(4)													21 <b>Sc</b> scandium 44.956													22 <b>Ti</b> titanium 47.867													23 <b>V</b> vanadium 50.942													24 <b>Cr</b> chromium 51.996													25 <b>Mn</b> manganese 54.938													26 <b>Fe</b> iron 55.845(2)													27 <b>Co</b> cobalt 58.933													28 <b>Ni</b> nickel 58.693													29 <b>Cu</b> copper 63.546(3)													30 <b>Zn</b> zinc 65.38(2)													31 <b>Ga</b> gallium 69.723													32 <b>Ge</b> germanium 72.630(6)													33 <b>As</b> arsenic 74.922													34 <b>Se</b> selenium 78.971(8)													35 <b>Br</b> bromine 79.904 [79.901, 79.907]													36 <b>Kr</b> krypton 83.798(2)												
37 <b>Rb</b> rubidium 85.468													38 <b>Sr</b> strontium 87.62													39 <b>Y</b> yttrium 88.906													40 <b>Zr</b> zirconium 91.224(2)													41 <b>Nb</b> niobium 92.906													42 <b>Mo</b> molybdenum 95.95													43 <b>Tc</b> technetium [101.07(2)]													44 <b>Ru</b> ruthenium 101.07(2)													45 <b>Rh</b> rhodium 102.91													46 <b>Pd</b> palladium 106.42													47 <b>Ag</b> silver 107.87													48 <b>Cd</b> cadmium 112.41													49 <b>In</b> indium 114.82													50 <b>Sn</b> tin 118.71													51 <b>Sb</b> antimony 121.76													52 <b>Te</b> tellurium 127.60(3)													53 <b>I</b> iodine 126.90													54 <b>Xe</b> xenon 131.29												
55 <b>Cs</b> caesium 132.91													56 <b>Ba</b> barium 137.33													57-71 lanthanoids													72 <b>Hf</b> hafnium 178.49(2)													73 <b>Ta</b> tantalum 180.95													74 <b>W</b> tungsten 183.84													75 <b>Re</b> rhenium 186.21													76 <b>Os</b> osmium 190.23(3)													77 <b>Ir</b> iridium 192.22													78 <b>Pt</b> platinum 195.08													79 <b>Au</b> gold 196.97													80 <b>Hg</b> mercury 200.59													81 <b>Tl</b> thallium 204.38 [204.38, 204.39]													82 <b>Pb</b> lead 207.2													83 <b>Bi</b> bismuth 208.98													84 <b>Po</b> polonium													85 <b>At</b> astatine													86 <b>Rn</b> radon												
87 <b>Fr</b> francium													88 <b>Ra</b> radium													89-103 actinoids													104 <b>Rf</b> rutherfordium													105 <b>Db</b> dubnium													106 <b>Sg</b> seaborgium													107 <b>Bh</b> bohrium													108 <b>Hs</b> hassium													109 <b>Mt</b> meitnerium													110 <b>Ds</b> darmstadtium													111 <b>Rg</b> roentgenium													112 <b>Cn</b> copernicium													113 <b>Nh</b> nihonium													114 <b>Fl</b> flerovium													115 <b>Mc</b> moscovium													116 <b>Lv</b> livermorium													117 <b>Ts</b> tennessine													118 <b>Og</b> oganesson												

Key:  
atomic number  
Symbol  
name  
conventional atomic weight  
standard atomic weight



57 <b>La</b> lanthanum 138.91													58 <b>Ce</b> cerium 140.12													59 <b>Pr</b> praseodymium 140.91													60 <b>Nd</b> neodymium 144.24													61 <b>Pm</b> promethium													62 <b>Sm</b> samarium 150.36(2)													63 <b>Eu</b> europium 151.96													64 <b>Gd</b> gadolinium 157.25(3)													65 <b>Tb</b> terbium 158.93													66 <b>Dy</b> dysprosium 162.50													67 <b>Ho</b> holmium 164.93													68 <b>Er</b> erbium 167.26													69 <b>Tm</b> thulium 168.93													70 <b>Yb</b> ytterbium 173.05													71 <b>Lu</b> lutetium 174.97												
89 <b>Ac</b> actinium 227.04													90 <b>Th</b> thorium 232.04													91 <b>Pa</b> protactinium 231.04													92 <b>U</b> uranium 238.03													93 <b>Np</b> neptunium													94 <b>Pu</b> plutonium													95 <b>Am</b> americium													96 <b>Cm</b> curium													97 <b>Bk</b> berkelium													98 <b>Cf</b> californium													99 <b>Es</b> einsteinium													100 <b>Fm</b> fermium													101 <b>Md</b> mendelevium													102 <b>No</b> nobelium													103 <b>Lr</b> lawrencium												

For notes and updates to this table, see [www.iupac.org](http://www.iupac.org). This version is dated 1 Decemb012.  
Copyright © 2018 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry

Abbildung 2.15: Periodensystem der Elemente

### 2.8.1 Hauptgruppenelemente

Dazu gehören die Gruppen 1, 2 sowie 13-18. In den Hauptgruppen kommen Metalle, Halbmetalle und Nichtmetalle vor. Alle Atome d. Elemente einer Hauptgruppe besitzen gleiche Elektronenkonfiguration auf der äußeren Schale. Die d- und f-Orbitale sind entweder leer oder vollständig besetzt.

### 2.8.2 Nebengruppenelemente

Die Nebengruppenelemente bilden die Gruppen 3-12. Hierbei handelt es sich um Metalle (Übergangsmetalle). Die d-Orbitale werden sukzessive aufgefüllt (Halb- und Vollbesetzung beachten!).

### 2.8.3 Lanthanoide und Actinoide

Bezeichnet werden diese Gruppen auch als innere Übergangsmetalle. Hier werden die 4f-Orbitale für die Lanthanoide und die 5f-Orbitale für die Actinoide aufgefüllt.

### 2.8.4 Periodische Eigenschaften (PE)-Radien

Der Abstand der Valenzelektronen vom Kern nimmt in einer Gruppe zu, das heißt der Radius wird größer. Auch nimmt innerhalb einer Periode die Kernladung zu und der Radius wird somit kleiner.

### 2.8.5 PE - Ionisierungs-energien/-potential (IE/IP)

Das IP bezeichnet man als die benötigte Energie, um ein Elektron vollständig aus dem Atom zu entfernen. Innerhalb einer Gruppe nimmt die Abschirmung zu. Das Elektron ist somit leichter zu ionisieren. In einer Periode nimmt die Kernladung zu, aber es gibt den Effekt der voll- und halbbesetzten Schalen. Somit ergibt sich zumindest ein tendenzieller Trend der ansteigenden IE innerhalb einer Periode von links nach rechts.

### 2.8.6 PE - Elektronenaffinität (EA)

Die Elektronenaffinität ist die frei werdende Energie (-) oder benötigte Energie (+) um ein Elektron aufzunehmen → negatives Ion. Kleine Atome besitzen eine größere Tendenz  $e^-$  aufzunehmen. Das Bestreben der Halogene die Edelgaskonfiguration zu erreichen, liefert die größten (-)EA-Werte.

### 2.8.7 PE - Elektronegativität (EN)

Die EN beschreibt die Fähigkeit eines Atoms das bindende Elektronenpaar in einer Atombindung an sich zu ziehen. Die EN nimmt mit wachsender Ordnungszahl in der Hauptgruppe ab und in der Periode zu.

### 2.8.8 PE - Metallisch

Der Metallcharakter beschreibt die Fähigkeit eines Atoms, Elektronen abzugeben und positiv geladene Kationen zu bilden (vgl. Ionisierungsenergie). Der Nichtmetallcharakter beschreibt die Fähigkeit eines Atoms, Elektronen aufzunehmen und negativ geladene Anionen zu bilden (vgl. Elektronenaffinität). Der metallische Charakter nimmt innerhalb einer Gruppe von oben nach unten zu und innerhalb einer Periode von links nach rechts ab. Für den nichtmetallischen Charakter gelten die entgegengesetzten Richtungen.

### 2.8.9 PE - Reaktivität

Für die Alkali- und Erdalkaligruppe nimmt die Reaktivität innerhalb der Gruppe mit steigender Ordnungszahl zu. Die Valenzelektronen sind weiter weg vom Kern und lassen sich so leichter abspalten. Bis zu den Chalkogenen und Halogenen kehrt sich dieser Trend um, mit steigender Kernladungszahl sinkt das Bestreben  $e^-$  aufzunehmen.

## 3 Stöchiometrie

### 3.1 Gesetz der Erhaltung der Massen

Bei allen chemischen Vorgängen bleibt die Gesamtmasse aller an der Reaktion beteiligten Stoffe konstant, Lavoisier (1744).

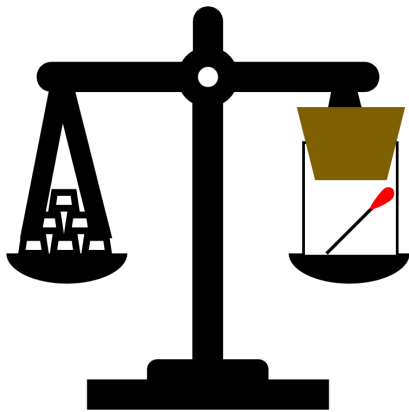


Abbildung 3.1: Was passiert, wenn man im folgenden Versuchsaufbau das Streichholz mit einem Bunsenbrenner entzündet?...

### 3.1.1 Gesetz der konstanten Proportionen

Das Massenverhältnis zweier sich vereiniger Elemente ist stets konstant, Proust, (1799).

### 3.1.2 Gesetz der multiplen Proportionen

Die Massenverhältnisse zweier sich zu verschiedenen chemischen Verbindungen vereiniger Elemente stehen im Verhältnis einfacher ganzer Zahlen zueinander, Dalton (1803).

### 3.2 Basisgrößen in der Chemie - SI-Einheitensystem

Die SI(Système International d'Unités)-Einheiten sind die gesetzlichen Einheiten im Messwesen. Zudem gibt es noch einige Ausnahmen, wie die atomphysikalische Einheit der Masse ( $u$ ) und der Energie ( $eV$ ), die auch zu den Basisgrößen gehören.

Größe	Symbol	SI-Einheit (*Basisgrößen)	Einheitszeichen	weitere zul. Einheiten
Länge	l	*Meter	m	
Dichte	$\rho$	Gramm pro Kubikzentimeter	$\frac{g}{cm^3}$	
Masse	m	*Kilogramm	kg	Gramm $1g = 10^{-3}kg$ , Tonne $1t = 10^3kg$
Kraft	F	Newton	$N \left( = \frac{kg \cdot m}{s^2} \right)$	
Energie	E	Joule	$J \left( = N \cdot m = \frac{kgm^2}{s^2} \right)$	Elektronvolt $1eV = 1,602 \cdot 10^{-19}J$
Stoffmenge	c	*Mol	mol	
Stoffmengen-konzentration	c	Mol pro Kubikmeter	$\frac{mol}{m^3}$	Mol pro Liter $\frac{mol}{l}$

Tabelle 3.1: Si Einheiten

### 3.3 Das Mol

Ein Mol ist definiert als die Stoffmenge einer Substanz, in der so viele Teilchen enthalten sind wie Atome in 12g des Kohlenstoffnuklids  $^{12}_6C$ . Die Teilchenzahl, die ein Mol eines jeden Stoffes enthält, nennt man Avogadro-Konstante  $N_A$ . Ihr Wert ist:  $6,02214 \cdot 10^{23} mol^{-1}$ . Sie ist die Proportionalitätskonstante zwischen Anzahl Teilchen und Stoffmenge:

$$N(X) = N_A \cdot n(X).$$

#### 3.3.1 Relative Atom- und Molekülmassen

Ein Mol einer molekularen Substanz besteht aus  $6,02214 \cdot 10^{23}$  Molekülen und entspricht einer relativen Masse in Gramm, wobei der Zahlenwert der relativen Atommasse  $A_r$  und Molekülmasse  $M_r$  in der Einheit  $u$  angegeben wird. Die relative Atommasse ist die Masse eines Atoms bezogen auf die Masse des Kohlenstoffisotops  $^{12}_6C$  mit  $12u$ . Die relative Molekülmasse  $M_r$  ergibt sich als Summe aller Atommassen des Moleküls. Für die Einheit ergibt sich:  $1u = \frac{g}{mol}$ .

#### 3.3.2 Molare Masse

Die Masse eines Mols wird als Molmasse  $M$  bezeichnet.  $M$  ist definiert als:

$$M(X) = \frac{m(X)}{n(X)}$$

in

$$\frac{g}{mol}.$$

Somit ergibt sich für ein Molekül:

$$M(\text{Molekuel}) = \sum z(X) \cdot M(x).$$

#### 3.3.3 Prozentuale Zusammensetzung chemischer Verbindungen

Der Masseanteil an einer Verbindung berechnet sich zu:

$$w(X) = \frac{m(X)}{\sum_X m} = \frac{n(X) \cdot M(X)}{\sum_X n(X) \cdot M(X)}.$$

#### 3.3.4 Stoffmengenanteil (Molenbruch)

Der Stoffmengenanteil ist gegeben als:

$$x(X) = \frac{n(X)}{\sum n}.$$



### 3.4 Ermittlung chemischer

#### Formeln

1. Der prozentuale Anteil jedes Elements gibt an wie viel Gramm dieses Elements in 100g Probe enthalten sind.

2. Die Stoffmenge ergibt sich aus:

$$n(X) = \frac{m(X)}{M(X)}$$

3. Aus dem Verhältnis der Stoffmengen ist das kleinste ganzzahlige Verhältnis durch systematisches Probieren zu ermitteln (Division aller Stoffmengen durch den kleinsten Wert).

#### 3.4.1 Beispiel zur Ermittlung der empirischen Formel

Die Analyse einer Verbindung ergibt einen Phosphorgehalt von 43,60 %. Als weiteres Element wird Sauerstoff erhalten. Wie lautet die empirische Formel dieser Verbindung?

Somit ergibt sich aus der Aufgabenstellung: In 100g der Verbindung sind 43,60 g Phosphor und 56,40 g Sauerstoff enthalten. Das ist in Mol:

$$n(P) = \frac{m(P)}{M(P)} = \frac{43,60g}{30,97\frac{g}{mol}} = 1,41mol,$$

$$n(O) = \frac{56,40g}{15,99\frac{g}{mol}} = 3,53mol.$$

Nun dividiert man beide Zahlen durch die kleinere:

$$\frac{1,41}{1,41} = 1,$$

$$\frac{3,53}{1,41} = 2,5.$$

Durch Multiplikation beider Zahlen mit 2 werden die ganzen Zahlen 2 und 5 erhalten. Die empirische Formel der gesuchten Verbindung lautet:



### 3.5 Empirische Formel und Molekularformel

Die **empirische Formel** gibt das einfache Zahlenverhältnis der Atome zueinander an. Für einfache ionische Verbindungen entspricht sie somit der **Molekularformel** / **Summenformel**. Diese gibt wiederum Auskunft über den Aufbau. Im Fall von Glucose unterscheiden sich beide. Die Empirische Formel lautet  $C_3H_6O_3$  und die Summenformel  $C_6H_{12}O_6$ .

### 3.6 Strukturformel

Die **Struktur- bzw. Konstitutionsformel** gibt an in welcher Art und Weise die Atome miteinander verknüpft sind.

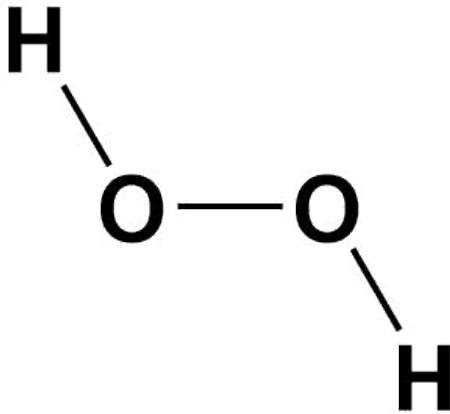
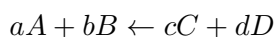


Abbildung 3.2: Strukturformel von Wasserstoffperoxid

### 3.7 Reaktionsgleichungen

Sie beschreiben den Ablauf chemischer Reaktionen.



Hier sind A, B, C und D die 'Gleichungsteilnehmer\*' wobei A, B die Edukte (Reaktanten) sind und C, D die Produkte.

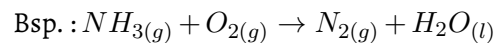
Die Kleinbuchstaben a, b, c und d bezeichnet man als stöchiometrische Koeffizienten. Sie beschreiben die Verhältnisse der auftretenden Stoffe in der betrach-

teten Reaktion. In einer (vollständigen) Reaktionsgleichung werden die Aggregatzustände in Klammern und als Subscript hinter die einzelnen Verbindungen gesetzt. Folgende Abkürzungen gibt es hier: **(s)** für fest (solidus), **(l)** für flüssig (liquidus), **(g)** für gasförmig (gaseous) und **(aq)** (aqua) -> in Wasser gelöst.

#### 3.7.1 Aufstellen von Reaktionsgleichungen

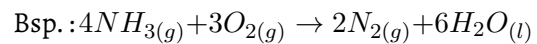
1. Alles auf die richtige Seite schreiben

Formeln aller Edukte und Produkte sortieren, hinschreiben und die Aggregatzustände in Klammern setzen.



2. Ausgleichen

Ausgleichen der beiden Seiten, um das Gesetz der Erhaltung der Massen zu erfüllen.



### 3.8 Gemische

#### 3.8.1 Homogene Gemische

Eine Lösung bezeichnet ein homogenes Gemisch zweier oder mehrerer Stoffe wie zum Bsp. ein Wasser-Ethanol-Gemisch.

### 3.8.2 Heterogenes Gemisch

Bezeichnet eine nicht-homogene Lösung. Solche Gemische besitzen in unterschiedlichen Bereichen unterschiedliche Eigenschaften. Ein Beispiel wäre das heterogene Gemisch zwischen Kaffee - Kaffeebohdensatz.

## 3.9 Lösungen

### 3.9.1 Massenkonzentration

Die Massenkonzentration gibt an wie viel Masse (g) in einem Liter Lösungsmittel gelöst ist.

### 3.9.2 Dichte

Die Dichte ist der Quotient zwischen der Masse eines Stoffes und dem Volumen (Archimedisches Prinzip oder die 'Goldkronenaufgabe in der Badewanne'):

$$\rho(X) = \frac{m(X)}{V}$$

Die Einheit ist  $\frac{g}{cm^3}$ .

### 3.9.3 Konzentration

Die Konzentration ist die gelöste Stoffmenge  $n[mol]$  von X, bezogen auf das Volumen an Lösung  $[l]$ :

$$c(X) = \frac{n(X)}{V(Loesung)}$$

Die Einheit ist  $\frac{mol}{l}$ .

### 3.9.4 Verdünnte Lösungen

Im Labor müssen oft verdünnte Lösungen aus konzentrierten hergestellt werden. Die benötigten Volumina oder erhaltenen Konzentrationen für eine Verdünnung können relativ einfach bestimmt werden. Für die Stoffmenge  $n$  eines gelösten Stoffes in einer Lösung der Anfangskonzentration  $c_1$  und des Anfangsvolumen  $V_1$  ergibt sich:

$$n = c_1 \cdot V_1$$

Wird die Lösung verdünnt, ergibt sich ein größeres Volumen  $V_2$ , die gelöste Stoffmenge bleibt jedoch gleich. Die Konzentration ergibt sich dann zu:

$$c_2 = \frac{n}{V_2} = c_1 \cdot \frac{V_1}{V_2}$$

### 3.9.5 Aktivitäten

Die Verwendung von Konzentrationen gilt eigentlich für ideale Systeme/Mischungen. In solchen Systemen gibt es keine Wechselwirkung zwischen den Teilchen. Die Aktivität berechnet sich mit,

$$a_i = \gamma_i \cdot \frac{c}{c^0}$$

wobei  $\gamma$  hier der Aktivitätskoeffizient und  $c/c^0$  die Konzentration  $c$  auf die Standard-

konzentration  $c^0$  bezogen ist. Für  $\gamma = 1$  wird die ideale Lösung beschrieben. Wechselwirkungen zwischen den Teilchen, wie elektrostatische führen zu den Abweichungen vom idealen Verhalten.

## 4 Chemische Bindung

### 4.1 Die Ionenbindung

Kochsalz, NaCl, ist der Paradevertreter dieser Art von Bindung. Es handelt sich hierbei um Verbindungen zwischen Alkalimetallen und Halogenen bzw. allgemeiner um Verbindungen zwischen 'ausgeprägten' Metallen und Nichtmetallen. Es besteht ein großer Elektronegativitätsunterschied zwischen den Bindungspartnern. Es bildet sich ein Anion-Kation-Paar. Das Erreichen der Edelgaskonfiguration ist die treibende Kraft.

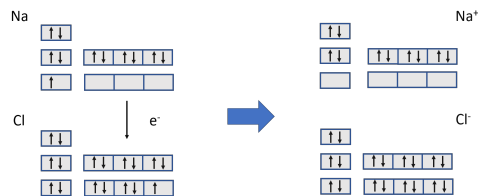


Abbildung 4.1: Elektronenübertrag

#### 4.1.1 Ionenbindung - Anziehungskräfte

Vereinfacht gesagt basiert die Ionenbindung auf der Anziehung zwischen geladenen

Teilchen (+ und -). Hier kann das Coulomb Gesetz ganz klassisch zur Beschreibung herangezogen werden.

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_k e z_a e}{r^2}$$

Der Übergang von kovalenter Bindung zur ionischen Bindung ist fließend und unterschiedliche Beiträge können zur Beschreibung der Bindung herangezogen werden.

#### 4.1.2 Kristallgitter

#### 4.1.3 Eigenschaften

Salze besitzen hohe Schmelz- und Siedepunkte. Dies ist durch die weitreichenden in alle Richtungen wirkenden elektrostatischen Wechselwirkungen im Kristall erklärbar. Im festen Zustand sind ionische Verbindungen nichtleitend, jedoch die Schmelzen werden leitend. Hier ist ein Ladungstransport aufgrund der Beweglichkeit der Ionen (keine festen Plätze mehr wie im Kristallgitter) möglich. Salze sind oft farblos, da die Valenzelektronen

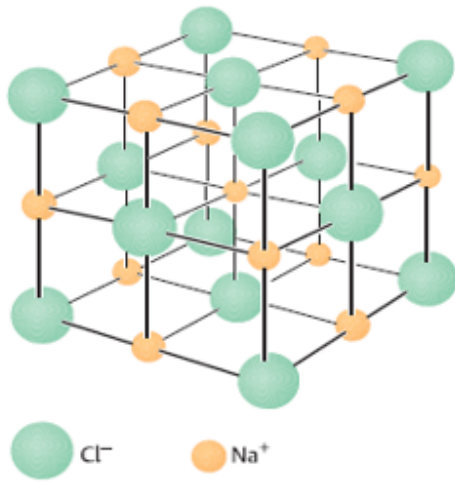


Abbildung 4.2: Ausschnitt aus der Natriumchloridstruktur, Mortimer, 2014 S. 105

relativ stark gebunden sind (Anregung im sichtbaren Bereich des Spektrums nicht leicht möglich → mehr Energie nötig). Salze sind hart und spröde. Ist der Belastungspunkt für eine Verschiebung der Gitterebenen zueinander jedoch erreicht, dann kommt es zum Bruch aufgrund der abstoßenden WW gleichnamiger Ladungen im Kristall.

## 4.2 Die Atombindung

'Geteiltes Leid ist halbes Leid', ist das Motto in der Atombindung. In einer Bindung zwischen zwei Atomen, werden sich die Elektronenpaar(e) geteilt. So können beide Partner Edelgaskonfiguration erreichen, im Idealfall zumindest. Bei der Atombindung sind die Elektronegativitäten der Bindungspartner ähnlicher. Es handelt sich hier außerdem um eine gerichtete Wechselwirkung / Bindung. Eine Atombindung kann mittels der Valenzbindungstheorie (VB) und/oder der Molekülorbitaltheorie (MO) beschrieben werden.

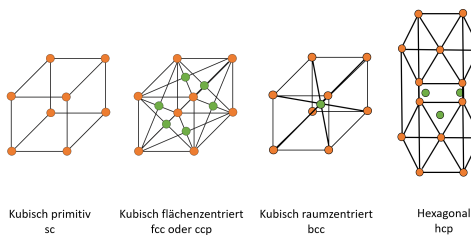


Abbildung 4.3: Beispiele für Gitter

## 4.3 MO-Theorie

Ausgehend von Atomorbitalen(AOs) die miteinander wechselwirken werden Molekülorbitale (MOs) aufgebaut. Die Elektronen halten sich in den so gebildeten MOs auf.

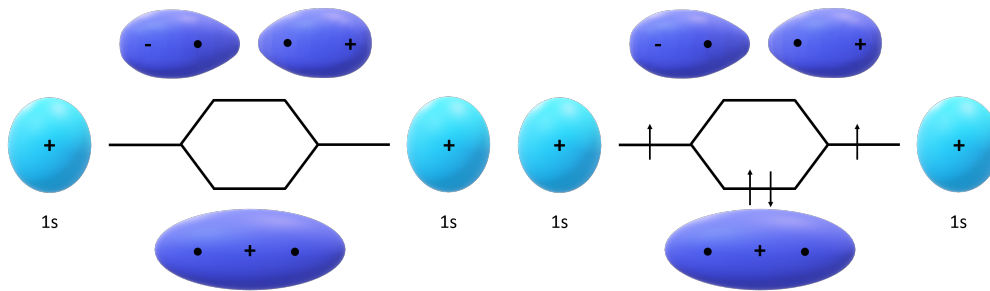


Abbildung 4.4: MO-Schema für  $\sigma$  und  $\sigma^*$  gebildet aus zwei 1s-AOs

Abbildung 4.5: MO-Besetzungsschema für  $H_2$

Elektronen in MOs befinden sich im Feld mehrerer Kerne. Nur Kombination(en) von AOs gleicher Symmetrie und vergleichbarer Energie sind 'erlaubt'. Die Anzahl gebildeter MOs ist gleich der Anzahl AOs. Es sind sowohl additive- (Bsp.  $1s+1s \rightarrow \sigma$ ) wie auch subtraktive- (Bsp.  $1s-1s \rightarrow \sigma^*$ ) Kombinationen möglich (siehe Abb. 7.4).

#### 4.3.1 Besetzung

Die Besetzung erfolgt nach der Hundschen Regel und unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips. Aus der MO-Besetzung kann die Bindungsordnung bestimmt werden:

$$BDO = \frac{1}{2} (N_{\text{bindende-e}^-} - N_{\text{anti-bindende-e}^-})$$

Für die Besetzung in Abb. 7.6 ergibt sich eine BDO von:

$$BDO = \frac{1}{2} (2 - 0) = 1.$$

#### 4.3.2 MOs aus p-AOs

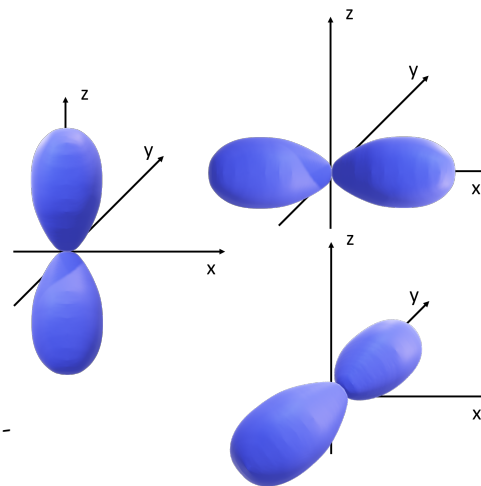


Abbildung 4.6: links:  $p_z$ -Orbital, rechts-oben:  $p_x$ -Orbital, rechts-unten:  $p_y$ -Orbital

Wenn sich zwei Atome entlang  $x$ ->Achse annähern, dann...

- $p_x$ -Orbitale  $\rightarrow$  bindendes  $\sigma - 2p$  und ein antibindendes  $\sigma^* 2p$ -Orbital
- $p_z$ -Orbitale  $\rightarrow$  bindendes  $\pi$ - und ein an-

bindendes  $\pi^*$ -Orbital  
 -  $p_y$ -Orbitale  $\rightarrow$  bindendes  $\pi$ - und ein antibindendes  $\pi^*$ -Orbital

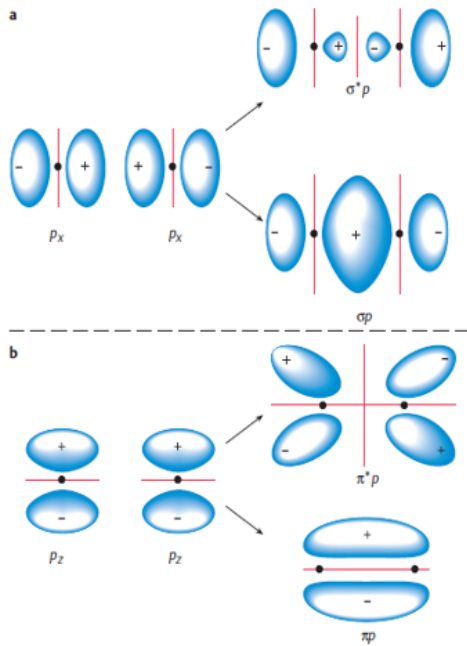


Abbildung 4.7: Kombination von p-Atomorbitalen zu MOs. Die Knotenebenen sind in rot markiert, Mortimer, 2014, S. 137

### 4.3.3 MO-Schema des $O_2$ -Moleküls

Beim  $O_2$ -Molekül wechselwirken die 1s, 2s und 2p Orbitale miteinander. Der Fokus soll im folgenden Schema jedoch auf die Valenzelektronen in 2s und 2p und die zugehörigen AOs gelegt werden (siehe Abb.

4.9). In einem ersten Schritt müssen die Atomorbitale anhand ihrer Energie zueinander angeordnet werden.

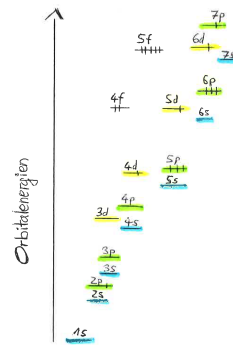


Abbildung 4.8: Energetische Abfolge der Orbitale

Im nächsten Schritt sollte bestimmt werden, welche AOs aufgrund Energetik und Symmetrie direkt miteinander wechselwirken können. So führt zum Beispiel die WW zwischen den aus  $2p_x$  und  $2s$  gebildeten MOs zu einer Absenkung des  $\sigma 2p$ -Orbitals im Vergleich zu den zwei  $\pi$ -2p-Orbitalen. Im letzten Schritt erfolgt dann die Besetzung nach Hundscher Regel und unter Einhaltung des Pauli-Prinzips.



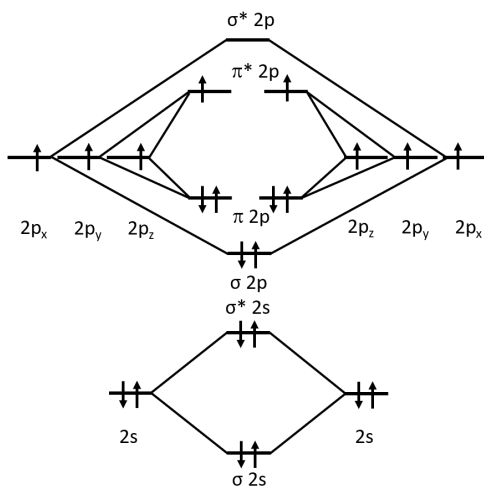


Abbildung 4.9: MO-Schema des  $O_2$ -Moleküls

#### 4.4 Die Valenzbindungstheorie (VB)

Die VB-Theorie ist eine weitere Beschreibungsmöglichkeit der chemischen Bindung. Es wird von Atomen ausgegangen, die miteinander wechselwirken. Die AOs überlappen miteinander. Für große Kernabstände kann man Elektronen Kernen zuordnen, für kleine nicht mehr. Heitler und London lieferten das theoretische Fundament für diese Theorie (Heisenbergsche Unschärferelation  $\rightarrow$  Elektronen sind ununterscheidbar).

Laut der Heisenbergschen Unschärferelation müssen beide der folgenden Wel-

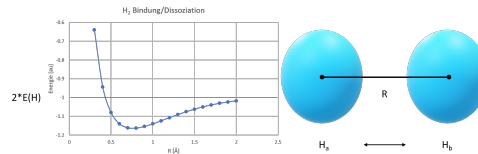


Abbildung 4.10: Dissoziationskurve des  $H_2$

lenfunktionen daher richtig sein:  $\Psi_A(2)\Psi_B(1)$  und  $\Psi_A(1)\Psi_B(2)$  Sowohl die positive und negative Linearkombination (LC) sind Lösung der Schrödinger-Gleichung:

$$\Psi_+ = \Psi_A(2)\Psi_B(1) + \Psi_A(1)\Psi_B(2)$$

und

$$\Psi_- = \Psi_A(2)\Psi_B(1) - \Psi_A(1)\Psi_B(2).$$

##### 4.4.1 $H_2$ bindende/antibindende Beschreibung

Die beiden LCs liefern einmal eine Beschreibung in der eine Bindung beschrieben wird  $\Rightarrow$  Elektronendichte zwischen den Kernen und eine nichtbindende Beschreibung  $\Rightarrow$  Knotenebenen zwischen den Kernen  $\rightarrow$  keine Elektronendichte Dies ist ganz genauso wie in der MO-Beschreibung.

#### 4.4.2 VB-Zusammenfassung

Wenn sich zwei H-Atome annähern führt dies zu einem Überlappen der beiden 1s-Orbitale → Es entsteht ein gemeinsames Orbital. Aufgrund des Pauli-Verbots ist dieses Orbital mit nur einem Elektronenpaar besetzbar bei jeweils entgegengesetztem Spin der Elektronen.

#### 4.5 VSEPR

##### Valence Shell Electron Pair Repulsion-Modell

In Molekülen des Typs  $AB_n$  ordnen sich die Elektronenpaare der Valenzschale so an, dass sie sich möglichst weit aus dem Weg gehen. Ähnlich wie gleich geladene Kugeln auf einer entgegengesetzt geladenen Kugeloberfläche. Eine Übersicht an Anordnungsmöglichkeiten ist hier zu finden :

[https://de.wikibooks.org/wiki/Allgemeine\\_und\\_Anorganische\\_Chemie/\\_Struktur\\_von\\_Molek%C3%BClen](https://de.wikibooks.org/wiki/Allgemeine_und_Anorganische_Chemie/_Struktur_von_Molek%C3%BClen)

#### 4.6 Hybridisierung

Mit dem Konzept der Hybridisierung ist es auch möglich Molekülstrukturen vorherzusagen. Es stammt von Pauling und die Basis bildet die Kombination unterschiedlicher Orbitale z.B. s- und p-Orbitale zu Hybridorbitalen. Ein gutes Beispiel ist

die Struktur von Methan. Beim Methan entstehen durch die Hybridisierung vier äquivalente Hybridorbitale. Es sind in diesem Fall  $sp^3$ -Orbitale, mit  $\frac{1}{4}s$ - und jeweils  $\frac{3}{4}p$ -Charakter. Jedes  $sp^3$  Hybridorbital ist mit einem ungepaarten Elektron besetzt. Es werden vier  $\sigma$ -Bindungen erhalten. Auch nicht an der Bindung beteiligte Elektronen können bei einer Hybridisierung eine Rolle spielen.

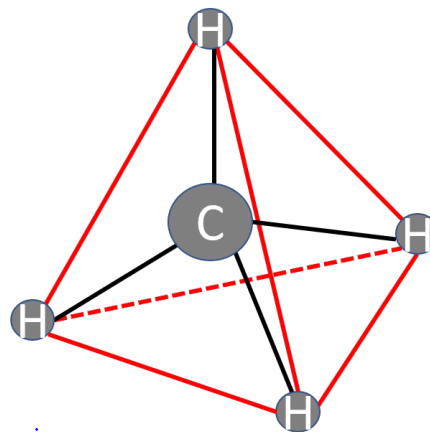


Abbildung 4.11:  $CH_4$

Weitere Hybridisierungsschemata sind in Abb. 4.12 dargestellt.

#### 4.7 Metallische Bindung

##### 4.7.1 Elektronengas

Das Metallgitter wird von positiv geladenen Ionenrümpfen gebildet. Dies entspricht

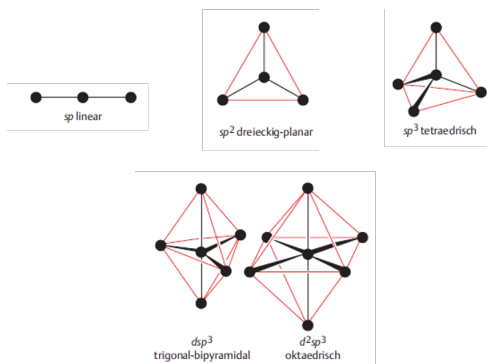


Abbildung 4.12:  $CH_4$

Abb. 4.14. Als Folge existiert eine dichte Folge von Energiezuständen.

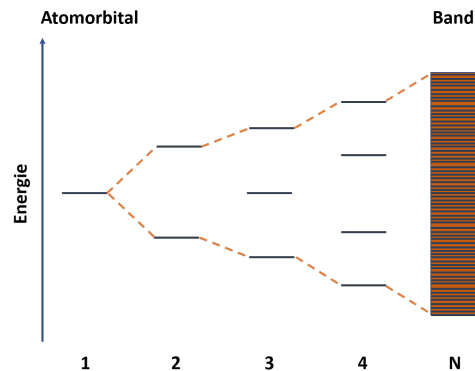


Abbildung 4.14: Bandmodell-MO-schematisch

den Gitterplätzen im Kristall. Die Valenzelektronen hingegen sind delokalisiert, sie können sich relativ frei bewegen. Dies wird als Elektronengas bezeichnet. Das Elektronengas bildet den Zusammenhalt des Metallgitters.

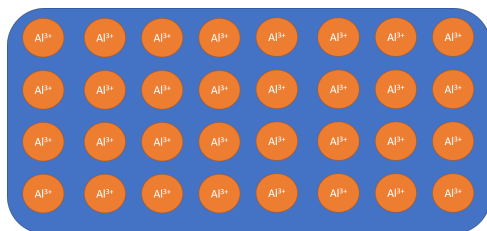


Abbildung 4.13: Elektronengasmodell

#### 4.7.2 Bändermodell

Der Metallkristall setzt sich aus vielen isolierten Metallatomen eines Metaldampfes zusammen. Bei der Annäherung kommt es zur Wechselwirkung der AOs miteinander. Dies führt zu einer Aufspaltung (siehe

### 4.8 Koordinative Bindung

Die koordinative Bindung ist die Art von Bindung, die in der Komplexchemie vorkommt. In diesem Fall werden die Elektronen nicht geteilt, sondern stammen von einem Bindungspartner.

#### 4.8.1 Komplexchemie

Komplexverb. besitzen ein Zentrum (Metall-Atom / Metall-Ion) und eine Ligandenhülle (mehrere Moleküle / Ionen. Der Ligand wirkt als Lewis-Base das Zentralatom wirkt als Lewis-Säure.

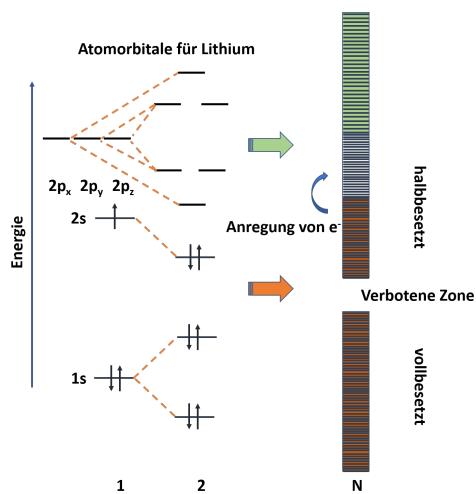


Abbildung 4.15: Bändermodell-mehrere Bänder

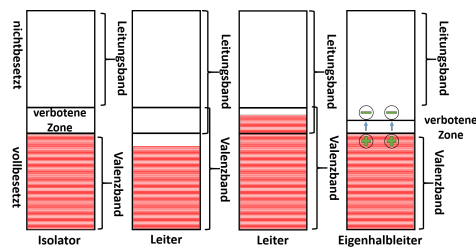


Abbildung 4.16: Bändermodell-Überblick

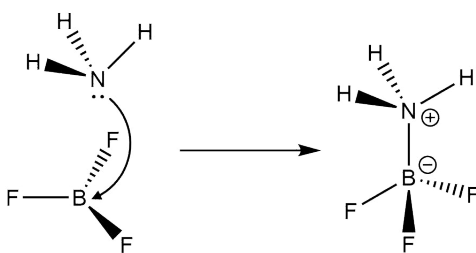


Abbildung 4.17: Koordinative Bindung

### 4.8.2 Lewis-Säure-Base-Konzept

Die Definition von Lewis ist allgemeiner als die Brönsted-Definition einer Protonenübertragungsreaktion. Eine Lewis-Säure ist ein Elektronenpaar-Akzeptor und verfügt über unbesetzte Orbitale in der Valenzelektronenschale. Hingegen eine Lewis-Base ist ein Elektronenpaar-Donator, das heißt sie besitzt ein freies Elektronenpaar. Bei der Reaktion entsteht eine Atombindung (siehe Abb. 4.17).

Beispiele für Lewis-Säuren:

$BF_3$ ,  $AlH_3$ ,  $SO_2$ ,  $Al^{3+}$ , ...

Beispiele für Lewis-Basen:

$NH_3$ ,  $PH_3$ ,  $H_2O$ ,  $F^-$ ,  $CN^-$ , ...

### 4.8.3 Koordinationszentrum

Das Koordinationszentrum bildet ein Zentralatom oder Ion. Die stabilsten Komplexe werden aus Metall-Ionen mit hoher positiver Ladung und kleinem Ionenradius gebildet. Es gibt sowohl einkernige wie auch mehrkernige Komplexe.

### 4.8.4 Liganden

Bei Liganden handelt es sich um Moleküle oder Ionen, welche ein 'freies' Elektronenpaar mitbringen müssen. Es wird eine Bindung mit Zentralteilchen geknüpft. Hier gibt es wiederum auch einzähnige

und mehrzählige Liganden. Einzählige Liganden sind zum Bsp.:  $NH_3$ ,  $H_2O$  oder  $CN^-$ . Ein bekannteres Beispiel für einen mehrzähligen Liganden ist EDTA (Ethylendiamin-tetraacetat). EDTA ist ein Chelat-Ligand und kann gegen Schwermetallvergiftungen eingesetzt werden.

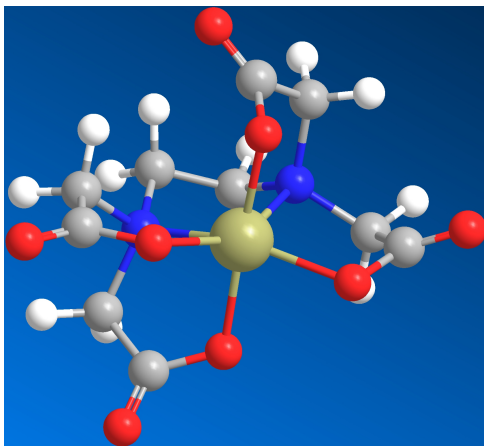


Abbildung 4.18: EDTA mit Pb.

#### 4.8.5 Koordinationszahl

Die Koordinationszahl ist definiert als die Anzahl der vom Zentralteilchen gebundenen Liganden. Es sind Werte im Bereich von 2-12 bekannt. Am häufigsten treten 2, 4 und 6 auf. Aus den Werten ergeben sich entsprechende Koordinationspolyeder.

#### 4.8.6 Nomenklatur

In der Komplexformel müssen enthalten sein: Zentralatom, Liganden, Anzahl und

Ladung. Die Koordinationseinheit wird in eckige Klammern gesetzt und die Ladung erscheint als Exponent. Das Zentralatom wird vor dem Liganden geschrieben, wobei die Liganden in alphabetischer Reihenfolge benannt werden. Abkürzungen werden genauso wie Formeln behandelt. Im Folgenden sind einige Beispiele gegeben:  $[Al(OH)_4]^-$ ;  $[Cu(H_2O)_2(NH_3)_4]^{2+}$ .

Für die Herleitung der systematischen Namen gibt es folgende Regeln:

1. Koordinationseinheit in eckige Klammern, ggf. Ladung als Exponent
2. Zentralatom vor Liganden
3. Alphabetische Reihenfolge bei den Liganden (Abkürzungen wie Formeln)
4. Mehratomige Liganden sowie Abkürzungen in runde Klammern
5. Oxidationszahl als Exponent hinter dem Zentralatom
6. Strukturinformationen vor die Komplexformel mit Hilfe von Vorsilben cis-, trans-, fac (facial), mer (meridional)
7. Anzahl wird in griechischen Zahlwörtern vorangestellt. Um bei komplizierten Liganden nicht die Übersicht zu verlieren, werden diese in Klammern gesetzt und mit Präfixen versehen: bis, tris, tetrakis, ...
8. Anionische Liganden enden auf -o
9. neutrale, positiv geladene -> keine bez. Endung
10. neutrale Liganden in () aber Ausnah-

men für häufig verwendete

11. Ladung in runden () hinter den Namen;  
alternativ Ox.stufe

12. nach Liganden folgt die Bezeichnung  
des Zentralatoms -> bei anionischen -at  
als bez. Endung

13. Beispiele:

- $[Al(OH)_4]^-$  - Tetrahydroxidoaluminat(III) bzw. Tetrahydroxidoaluminat(I-)
- $[Cu(H_2O)_2(NH_3)_4]^{2+}$  - Tetraammindiaquakupfer(II)
- $[Cu(H_2O)_2(CH_3NH_2)_4]^{2+}$  - Diaquatetrakis(methylamin)kupfer(II) - hier nicht Tetramethylamin ->  $N(CH_3)_4^+$

#### 4.8.7 Liste häufiger Liganden

Anionische Liganden			Neutrale Liganden	
Abkürzung	alt	neu	Abkürzung	neu
$F^-$	fluoro	fluorido	$H_2O$	aqua
$Cl^-$	chloro	chlorido	$NH_3$	ammin
$OH^-$	hydroxo	hydroxido	$CO$	carbonyl
$CN^-$	cyano	cyanido	$NO$	nitrosyl
$NCO^-$		cyanato		
$O^{2-}$	oxo,oxido	oxido		
$NH^{2-}$		amido		
$H^-$		hydrido		

Tabelle 4.1: Liste von anionischen und neutralen Liganden und deren Bezeichnung

## 4.9 Nichtbindende Wechselwirkungen

- Elektrostatische WW
- VdW-Wechselwirkung
- Wasserstoffbrückenbindungen
- Hydrophobe WW

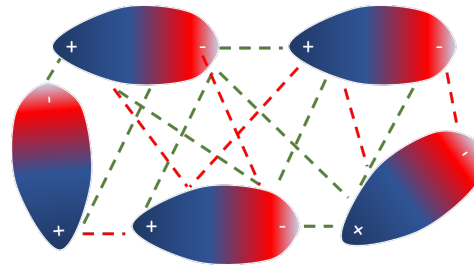


Abbildung 4.20: Dipol-Dipol-WW; attraktive WW in grün, repulsive WW in rot

### 4.9.1 Elektrostatische WW

Hier summiert man die Wechselwirkungen zwischen Molekülen, die ein permanentes Dipolmoment besitzen, wie zum Beispiel HCl und oder die Wechselwirkungen solcher Moleküle mit Ionen oder die Wechselwirkung zwischen Ionen auf. Eine solche Wechselwirkung kann wiederum mit dem Coulomb-Gesetz beschrieben werden (siehe Abb. 4.19 und 4.20).

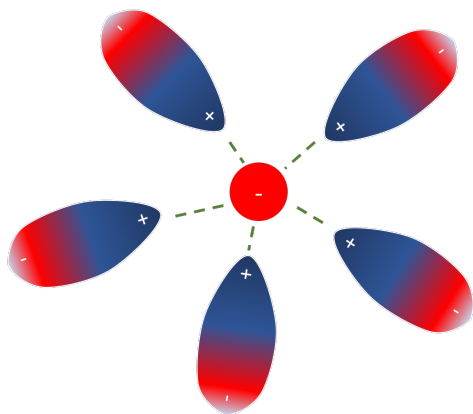


Abbildung 4.19: Dipol-Ion-WW

### 4.9.2 VDW-WW

Am Beispiel der Wechselwirkung zwischen zwei Argon-Atomen kann man sich die nicht-bindenden Wechselwirkungen gut veranschaulichen. Das Lennard-Jones Potential beschreibt die NB-WW (siehe Abb. 4.21). Unter den einzelnen Beiträgen/Typen kann unterschieden werden:

- elektrostatische WW durch Ladungsverteilung (Dipol  $\leftrightarrow$  Dipol)
- Induktion  $\rightarrow$  Multipolmomente von Monomer 1 induziert Multipolmoment in zweitem Monomer (perm. Dipol  $\leftrightarrow$  ind. Dipol)
- Dispersion / London-Kräfte (ind. Dipol  $\leftrightarrow$  ind. Dipol)



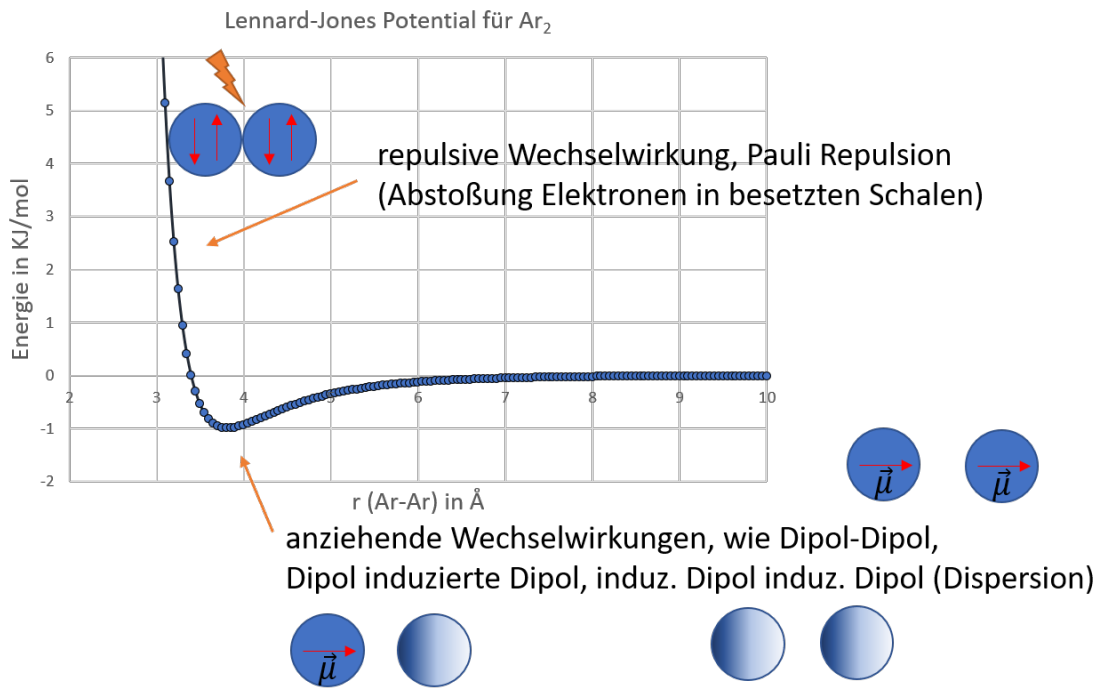


Abbildung 4.21: Das Lennard-Jones Potential für Ar<sub>2</sub>, definiert als

$$V = 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right)$$

### 4.9.3 Wasserstoffbrückenbindungen

Die H-Brücke ist eine Art der Dipol-Dipol-Bdg. Hier fungiert das Wasserstoff als Brücke zwischen zwei elektronegativen Atomen. Mit einem Atom ist eine polare kovalente Atombindung ausgebildet und mit dem anderen besteht eine Verbindung durch elektrostatische Kräfte. Die Bindungslänge beträgt ungefähr  $18\text{nm}$  und der Winkel:  $180^\circ \pm 20^\circ$ , für H-Brücken in Wasser. Die Ausbildung von H-Brücken in Wasser ist am prominentesten, aber auch in anderen Verbindungen bestehen H-Brücken, so zum Beispiel in Fluorwasserstoff (HF).

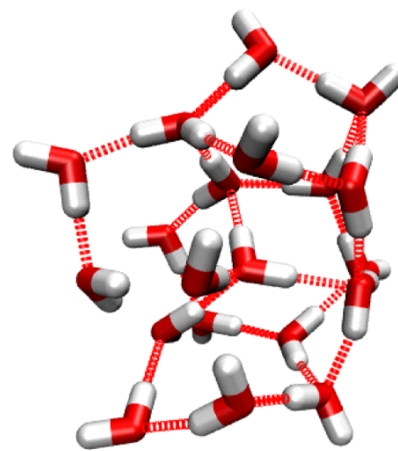
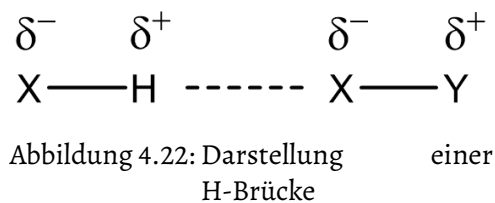


Abbildung 4.23: Kleiner Wassercluster mit eingezeichneten H-Brücken

# 5 Redoxchemie

## 5.1 Definitionen

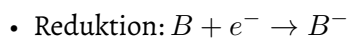
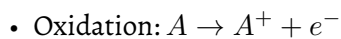
### 5.1.1 Historisch

Die **historische** Definition der Oxidation lautet, dass es sich bei der Oxidation um die Aufnahme von Sauerstoff handelt. Das deckt zum Bsp. Verbrennungsprozesse und 'Rosten' ab. In einer Reduktion wird Sauerstoff entfernt.

### 5.1.2 Heutige Definition

- Die Oxidation ist eine Elektronenabgabe
- Die Reduktion ist eine Elektronenaufnahme

Reduktion und Oxidation treten immer paarweise auf, da nur  $e^-$  aufgenommen werden können, wenn irgendwo welche abgegeben werden.



Redoxreaktionen sind **Elektronenübertragungsreaktionen**.

## 5.2 Oxidationszahlen

Oxidationszahlen dienen zur formalen Beschreibung von Redox-Prozessen. Sie sind fiktive Ladungen für Atome (in Verbindungen). Die Oxidationszahl eines einzelnen Atoms oder im elementaren Zustand ist Null. Die Oxidationszahl eines einatomigen Ions in einer ionischen Verbindung entspricht der Ladung des Ions.

### 5.2.1 Oxidationszahlen in kovalenten Verbindungen

Hier wird das Molekül gedanklich in Ionen aufgespalten und der elektronegativere Partner erhält Elektronen zugeordnet. Wenn beide vom gleichen Atomtyp sind, bekommen beide die Hälfte der Bindungselektronen.

Verbindung	auftretende Ionen	Oxidationszahl (Kation)	Oxidationszahl (Anion)
$NaCl$	$Na^+, Cl^-$	$Na^+ (+I)$	$Cl^- (-I)$
$CaO$	$Ca^{2+}, O^{2-}$	$Ca^{2+} (+II)$	$O^{2-} (-II)$
$Fe_3O_4$	$2Fe^{3+}, Fe^{2+}, 4O^{2-}$	$Fe_3 (+8/3)$	$O_4^- (-II)$

Tabelle 5.1: Oxidationszahlen in ionischen Verbindungen

Verbindung	fiktive Ionen	Ox.zahl fikt. Kation(en)	Ox.zahl fikt. Anion(en)
$HCl$	$H^+, Cl^-$	$H (+I)$	$Cl (-I)$
$H_2O_2$	$2H^+, 2O^-$	$H_2 (+I)$	$O_2 (-I)$
$HNO_3$	$H^+, N^{5+}, 3O^{2-}$	$H (+I), N (+5)$	$O_3 (-II)$

Tabelle 5.2: Oxidationszahlen in kovalenten Verbindungen

### 5.2.2 Regeln zu Oxidationszahlen

Die Summe aller Oxidationszahlen muss Null ergeben oder Ladung des Ions.

#### Allgemein

- Sauerstoff meistens -II
- H kann +I, -I und 0 annehmen
- F immer -I

#### in organischen Verb.

- C kann Werte zwischen -IV und +IV annehmen
- H meist +I (außer in Hydriden -I)
- O meist -II
- Halogen -I
- N meist -II (häufige Ausnahmen sind Nitro- und Nitrosogruppen)

#### Ox.Zahl für C

- liegt eine Bindung zu einem gleichen Bindungspartner vor, so wird diese nicht mitgezählt (benachbarte Kohlenstoff-Atome verhalten sich neutral).

- Für jede Bindung zu einem elektropositiveren Partner und auch für jede positive Ladung in der Verbindung wird -1 addiert. Doppelbindungen zählen dabei zweifach.
- Für jede Bindung zu einem elektronegativeren Partner und auch für jede negative Ladung in der Verbindung wird +1 addiert. Doppelbindungen zählen dabei zweifach.

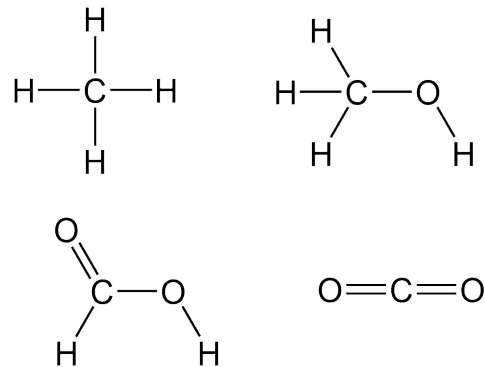
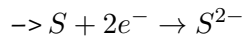


Abbildung 5.1: Kohlenstoffverbindungen Oxidationszahlen von C; oben links: -IV; oben rechts: -II; unten links: +III; unten rechts: +IV

Eine Liste von Oxidationsstufen der Elemente ist zu finden auf [https://de.wikipedia.org/wiki/Liste\\_der\\_Oxidationsstufen\\_der\\_chemischen\\_Elemente](https://de.wikipedia.org/wiki/Liste_der_Oxidationsstufen_der_chemischen_Elemente)

### 5.3 Redoxreaktionen (allg.)



#### 5.3.1 Oxidationszahlen

- Oxidation  $\rightarrow e^-$ -Abgabe  $\rightarrow$  Oxidationszahl des oxidierten Teilchens erhöht sich
- Reduktion  $\rightarrow e^-$ -Aufnahme  $\rightarrow$  Oxidationszahl des reduzierten Teilchens wird kleiner

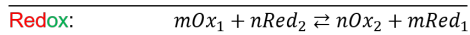
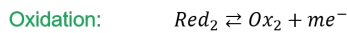
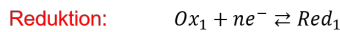
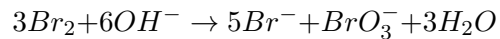


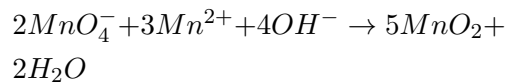
Abbildung 5.2: Redoxgleichungssystem

#### 5.3.3 Disproportionierung und Komproportionierung

Eine Redoxreaktion bei der ein Element in einer Verbindung gleichzeitig oxidiert und reduziert wird, nennt man **Disproportionierung**. Es entstehen zwei Produkte mit unterschiedlichen Oxidationszahlen



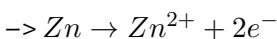
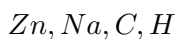
Das Gegenstück zur Disproportionierung ist die **Komproportionierung**:



#### 5.3.2 Begrifflichkeiten

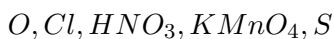
**Reduktionsmittel** sind Substanzen, die Elektronen abgeben bzw. denen Elektronen entzogen werden. Sie selbst werden bei diesem Vorgang oxidiert.

- Bsp.:



**Oxidationsmittel** sind Substanzen, die dem Reaktionspartner Elektronen entziehen und damit dessen Oxidation bewirken. Sie selbst werden bei diesem Vorgang reduziert.

- Bsp.:

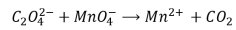


#### 5.4 Redoxgleichungen aufstellen

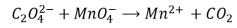
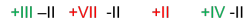
##### 5.4.1 Allgemeine Vorgehensweise

1. Oxidationsstufen bestimmen
2. Teilgleichungen für Oxidation und Reduktion aufstellen
3. Elektroneutralität
4. Ausgleich der elektrischen Ladungen, Atomausgleich
5. Elektronenbilanz
6. Summe der Teilgleichungen bilden

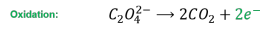
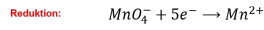
**Beispiel:** Wie lautet die Redoxgleichung für folgende Reaktionsgleichung?



1. Oxidationsstufen bestimmen



2./3. Aufstellen der Oxidations- und Reduktionsgleichung; Elektroneutralität



4. Ausgleich der elektrischen Ladungen, Atomausgleich

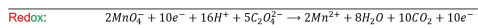
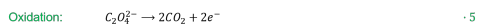
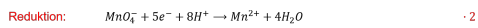
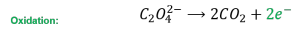
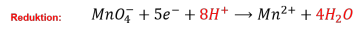


Abbildung 5.3: Redoxgleichungen aufstellen

7. 'Kürzen'

8. Check: Gleiche Anzahl der jeweiligen Elemente auf beiden Seiten? Gesamtladung gleich?

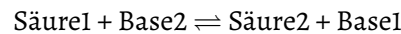
# 6 Säuren und Basen

## 6.1 Historischer Überblick

- **Arrhenius (1887)**  
Säuren sind Stoffe, die in wässriger Lösung  $H^+$ -Ionen bilden. Basen sind Stoffe, die in wässriger Lösung  $OH^-$ -Ionen bilden.
- **Brønsted-Lowry (1923)**  
Säuren sind Stoffe, die Protonen abgeben können  $\rightarrow$  Protonendonatoren. Basen sind Stoffe, die Protonen aufnehmen können  $\rightarrow$  Protonenakzeptoren.
- **Lewis (1938)**  
Säuren sind Elektronenpaar Akzeptoren. Basen sind Elektronenpaar Donatoren

## 6.2 Brønsted-Lowry-Konzept

Eine Säure-Base-Reaktion ist eine Protonenübertragungsreaktion. Hier bilden zwei Säure-Base-Paare ein konjugiertes bzw. korrespondierendes Säure-Base-Paar.  
 $HA + B \rightleftharpoons HB^+ + A^-$



### 6.2.1 Struktur von 'Brønsted-Säuren'

Eine Brønsted-Säure enthält allg. polar gebundenen Wasserstoff, z.B. Bindung von H zu Nichtmetallen.

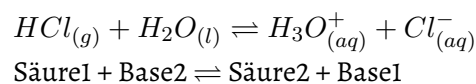


Abbildung 6.1: Salzsäure

Bei Elementen mit einer geringeren Elektronegativität (z.B. S, C, N, P) können weitere Bindungen zu Sauerstoff die Polarität der H-X-Bindung erhöhen (siehe Abb. 7.2).

## 6.3 Amphoterie

Amphoter sind Verbindungen, die in Abhängigkeit des Charakters eines weiteren Säure-Base-Paars als Säure oder Base reagieren können. Ein Beispiel ist hier Wasser:





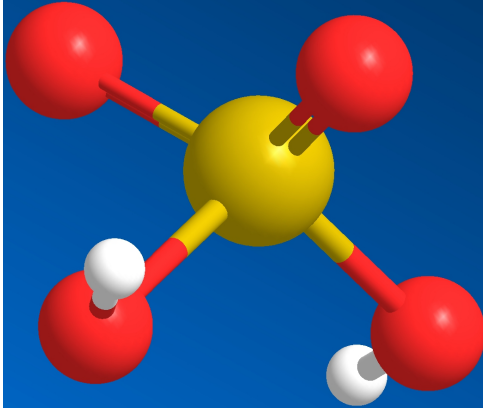
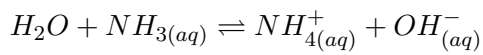
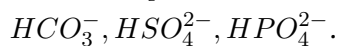


Abbildung 6.2: Schwefelsäure

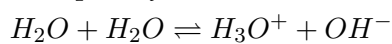


Weitere Amphotere sind:



### 6.3.1 Autoprotolyse des Wassers

Als Folge der amphoteren Eigenschaften von Wasser reagiert es auch mit sich selbst (**Autoprotolyse**).



Hier lässt sich das Massenwirkungsgesetz (MWG) anwenden.

### 6.3.2 Einschub

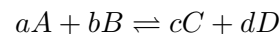
#### Massenwirkungsgesetz (MWG)

Guldberg und Waage ermittelten das MWG 1864 experimentell. Es kann über die Betrachtung der Reaktionskinetik hergeleitet werden. Die Geschwindigkeit einer Reaktion ist direkt proportional zur relativen

Aktivität der Edukte hoch deren stöchiometrischen Koeffizienten

$$v \sim a(\text{Edukte})^{|\nu_i|}$$

und je höher die Aktivität der Edukte ist, desto schneller läuft die Reaktion ab. Während der Hinreaktion nimmt die Aktivität der Edukte ab und die Aktivität der Produkte zu. Dies hat zur Folge, dass die Geschwindigkeit der Hinreaktion kleiner wird und die der Rückreaktion größer. Wenn beide Geschwindigkeiten gleich groß sind, werden in gleicher Zeit die gleiche Menge an Edukt und Produkt gebildet.



Die Geschwindigkeiten für die Hin- und Rückreaktionen sind:

$$v_{hin} = k_{hin} \cdot a^a(A) \cdot a^b(B)$$

und

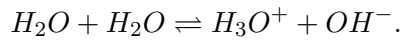
$$v_{rueck} = k_{rueck} \cdot a^c(C) \cdot a^d(D).$$

Im GG sind  $v_{hin} = v_{rueck}$ . Womit sich folgendes ergibt:

$$K = \frac{k_{hin}}{k_{rueck}} = \frac{a^c(C) \cdot a^d(D)}{a^a(A) \cdot a^b(B)}.$$

### 6.3.3 Autoprotolyse des Wassers - MWG

Die Gleichgewichtsreaktion ist wie folgt:



Hier lässt sich das MWG anwenden:

$$K_c = \frac{c_{H_3O^+} \cdot c_{OH^-}}{c_{H_2O}^2}$$

Das GG liegt auf der linken Seite, die Konzentration von 55,55 mol/l ist praktisch konstant. So kann die Konzentration in die GG-Konstante mit einbezogen werden:

$$c_{H_3O^+} \cdot c_{OH^-} = K_c \cdot c_{H_2O}^2 = K_W.$$

Für eine Temperatur von 25°C folgt  $K_W = 1 \cdot 10^{-14} \text{ mol}^2 \text{ l}^{-2}$ .

### 6.3.4 Ionenprodukt des Wassers

$H_3O$  und  $OH^-$  werden im gleichen Umfang gebildet, daher für erhält man für 25°C:

$$c_{H_3O^+} = c_{OH^-} = \sqrt{K_W} = 10^{-7} \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$$

Die Konzentrationen in reinem Wasser sind also sehr klein.

### 6.4 pH-Wert

Der pH-Wert ist definiert als der negative dekadische Logarithmus der  $H_3O^+$ -Konzentration:

$$pH = -\lg(c_{H_3O^+}).$$

Daraus folgt ein pH-Wert für reines Wasser von:

$$pH = -\lg(c_{H_3O^+}) = -\lg(1 \cdot 10^{-7} \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}) = 7.$$

Die pH-Wert Skala erstreckt sich von 0-14. Ist der pH-Wert gleich 7 so bezeichnet man eine Lösung als neutral ( $c_{H_3O^+} = c_{OH^-}$ ). Für Werte kleiner 7 sind es saure Lösungen und für Werte größer 7 basische. Der **pOH**-Wert ist analog über die Konzentration an  $OH^-$ -Ionen definiert:

$$pOH = -\lg(c_{OH^-}).$$

Für die Summe gilt:

$$pH + pOH = -\lg(K_W) = 14.$$

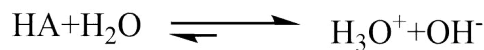
### 6.5 Stärke von Brønsted-Säuren/Basen

Allgemein müsste hierfür die Frage beantwortet werden, wie leicht ist die Abgabe / Aufnahme von Protonen möglich? Hier ist auch immer der jeweilige Reaktionspartner entscheidend. Die stärkste Säure reagiert mit der stärksten Base. Dies

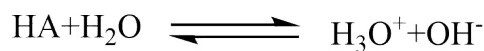
führt zur Bildung schwächster korrespondierender Base und Säure. Die Stärke von Säuren und Basen ist vergleichbar, wenn sich auf die gleiche Base/Säure bezogen wird. Im Allgemeinen ist dies Wasser.

### 6.5.1 Starke und schwache Säuren

Starke Säuren dissoziieren vollständig.



Schwache Säuren dissoziieren nur teilweise; echtes GG:



### 6.6 Der $pK_S$ -Wert

Der  $pK_S$ -Wert ist ein qualitatives Maß zur Bestimmung der Säurestärke. Er ergibt sich aus dem Aufstellen des MWG, wobei in verd. Lösungen die  $\text{H}_2\text{O}$ -Konzentration annähernd konstant ist:

$$K_S = \frac{c_{\text{H}_3\text{O}^+} \cdot c_{\text{A}^-}}{c_{\text{HA}}}$$

$K_S$  ist die Säurekonstante, wobei der negative dekadische Logarithmus dieses Werts verwendet wird:

$$pK_S = -\lg(K_S).$$

### 6.7 Der pH-Wert von starken Säuren

Das Protolysegleichgewicht liegt weit auf der rechten Seite, pro Säure-Molekül wird praktisch ein  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Molekül gebildet. Somit ergibt sich:

$$c_{\text{HA}} = c_{\text{H}_3\text{O}^+} \rightarrow \text{pH} = -\lg(c_{\text{HA}}).$$

### 6.8 Der pH-Wert von schwachen Säuren

Schwache Säuren dissoziieren nur unvollständig in wässriger Lösung (siehe Abb. 7.4). Hierfür kann das MWG aufgestellt werden

$$K_S = \frac{c_{\text{H}_3\text{O}^+} \cdot c_{\text{A}^-}}{c_{\text{HA}}},$$

wobei aus einem Molekül HA jeweils ein  $\text{H}_3\text{O}^+$ - und ein  $\text{A}^-$ -Ion entsteht. Somit gilt:  $c_{\text{H}_3\text{O}^+} = c_{\text{A}^-}$ . Aus dem Protolyse-GG ergibt sich mit  $c_{\text{H}_3\text{O}^+} = c_{\text{A}^-}$

$$c_{\text{H}_3\text{O}^+}^2 = K_S \cdot c_{\text{HA}}$$

und wird zu

$$c_{\text{H}_3\text{O}^+} = \sqrt{K_S \cdot c_{\text{HA}}}.$$

Die Konz. der Säuremolek. ( $c_{\text{HA}}$ ) im GG entspricht der Anfangskonzentration, ver-

mindert um die umgesetzten HA-Moleküle: **6.9.1 Zusammenfassung MPS**

$$c_{HA} = c_{Saeure} - c_{H_3O^+}$$

Damit kann der pH-Wert wie folgt berechnet werden:

$$pH = -\frac{1}{2} \cdot (pK_S - \lg(c_{Saeure}))$$

## 6.9 Mehrprotonige Säuren (MPS)

Für den Fall, dass mehr als nur ein Proton abgespalten wird gilt allgemein für die einzelnen Protolyseschritte:  $K_S(I) > K_S(II) > K_S(III)$ . Für jeden der Schritte kann das MWG aufgestellt werden.

### 1. Abspaltung

- $H_2A + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + HA^-$
- mit der Protolysekonstanten:
- $\frac{c_{H_3O^+} \cdot c_{HA^-}}{c_{H_2A}} = K_S(I)$
- die Konzentration von  $H_3O^+$  ist gleich der  $HA^-$ -Ionen

### 2. Abspaltung

- $HA^- + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + A^{2-}$
- $\frac{c_{H_3O^+} \cdot c_{A^{2-}}}{c_{HA^-}} = K_S(II)$
- die Konz. von  $H_3O^+$  und  $HA^-$  Ionen ändert sich sehr wenig  $\rightarrow$  Konz. d.  $A^{2-}$ -Ionen gleich  $K_S(II)$

Multiplikation der beiden Protolysekonstanten:

$$\begin{aligned} K_S(I) \cdot K_S(II) &= \frac{c_{H_3O^+} \cdot c_{HA^-} \cdot c_{H_3O^+} \cdot c_{A^{2-}}}{c_{H_2A} \cdot c_{HA^-}} \\ &= \frac{c_{H_3O^+}^2 \cdot c_{A^{2-}}}{c_{H_2A}} \end{aligned}$$

Diese Gleichung kann umgestellt werden und es wird eine Beziehung erhalten, mit der in Abhängigkeit des pH-Werts die  $A^{2-}$ -Konzentration berechnet werden kann:

$$c_{H_3O^+}^2 \cdot c_{A^{2-}} = K_S(I) \cdot K_S(II) \cdot c_{H_2A}$$

## 6.10 $pK_B$ -Wert von Basen

- alles wie gehabt :)
- $A^- + H_2O \rightleftharpoons OH^- + HA$
- MWG aufstellen:

$$\frac{c_{OH^-} \cdot c_{HA}}{c_{A^-} \cdot c_{H_2O}} = K_B$$

Somit erhalten wir:  $pK_B = -\lg(K_B)$ . Es besteht folgender Zusammenhang zwischen  $pK_S$ - und  $pK_B$ -Wert: Das Produkt aus Säure- und Basekonstante liefert das Ionenprodukt des Wassers.

$$K_S \cdot K_B = \frac{c_{H_3O^+} \cdot c_{A^-} \cdot c_{OH^-} \cdot c_{HA}}{c_{HA} \cdot c_{A^-}} = c_{H_3O^+} \cdot c_{OH^-} = K_W$$

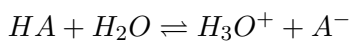
und somit:

$$pK_B + pK_S = 14.$$

Hieraus folgt: Je stärker eine Säure, desto schwächer die Base (und umgekehrt).

## 6.11 Pufferlösungen

Der pH-Wert von Pufferlösungen ist gegenüber Säure- bzw. Base-Zugabe relativ stabil. Sie bestehen aus einer schwachen Säure / Base und dem korrespondierenden Salz. Anwendung des MWG auf Protolysereaktion liefert:



$$K_S = \frac{c_{H_3O^+} \cdot c_{A^-}}{c_{HA} \cdot c_{H_2O}},$$

jetzt umstellen

$$c_{H_3O^+} = K_s \frac{c_{HA}}{c_{A^-}}$$

und daraus folgt:

$$pH = pK_S + \lg \frac{c_{A^-}}{c_{HA}}.$$

## 6.12 Säure-Base Titration

Die SB-Titration ist ein maßanalytisches Verfahren. Sie basiert auf einer Kombination aus Volumenmessung und stöchiometrische Berechnung. Es wird eine Maßlösung bekannter Konzentration zur Probe-

bzw. Analyselösung gegeben, bis diese in einer bekannten Reaktion vollständig umgesetzt ist (Äquivalenzpunkt). Dies entspricht der gesuchten Stoffmenge in der Analyselösung. Hier soll nur exemplarisch die Titration einer starken Säure mit einer starken Base behandelt werden.

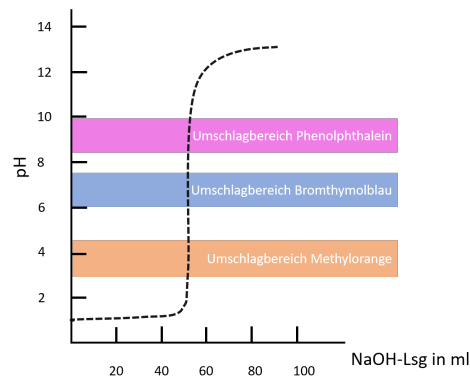


Abbildung 6.3: Titration von 50.0 ml HCl (0.100 mol/l) mit Natronlauge (0.100 mol/l), schematisch

- am Äquivalenzpunkt  $\rightarrow$  Salzlösung  $c(Na^+) = c(Cl^-)$
- nach ca. 49.9 ml erreicht  $\rightarrow$  pH=7
- $HCl_{aq} + NaOH_{aq} \rightarrow NaCl_{aq} + H_2O_{aq}$
- wenn  $c(HCl)$  unbekannt ist, dann kann mit Hilfe der Neutralisationsgleichung  $n(HCl) = n(NaOH)$   $c(HCl)$  berechnet werden

$$c(\text{HCl}) \cdot V(\text{HCl}) = c(\text{NaOH}) \cdot V(\text{NaOH})$$

→

$$c(\text{HCl}) = c(\text{NaOH}) \cdot \frac{V(\text{NaOH})}{V(\text{HCl})}$$

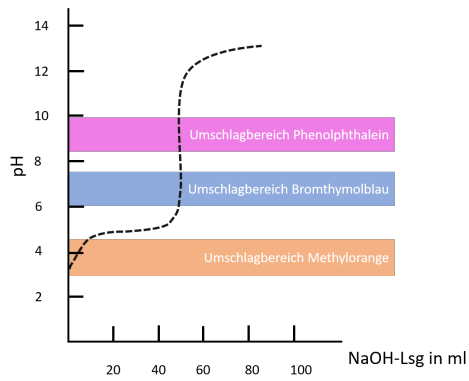


Abbildung 6.4: Titration von 50.0 ml Essigsäure (0.100 mol/l) mit Natronlauge (0.100 mol/l), schematisch

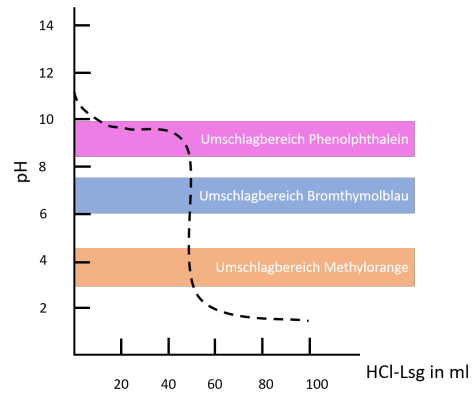


Abbildung 6.5: Titration von 50.0 ml Ammoniak (0.100 mol/l) mit Salzsäure (0.100 mol/l), schematisch

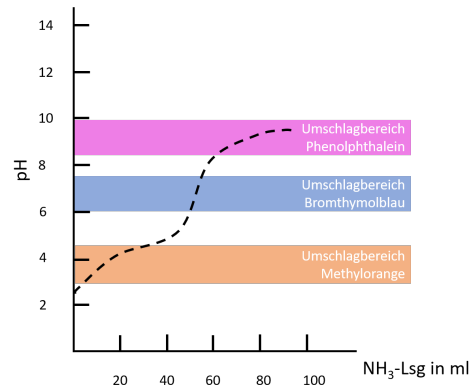


Abbildung 6.6: Titration von 50.0 ml Essigsäure (0.100 mol/l) mit Ammoniak (0.100 mol/l), schematisch

# 7 Grundlagen Organische Chemie

## 7.1 Historisch

Zunächst Chemie des Lebens -> Verbindungen, die in Lebewesen bzw. der 'belebten Natur' vorkommen...das wars auch schon...und das ist nicht nur der Fall.

## 7.2 Kohlenstoff als zentrales Element

Das Erreichen der Edelgaskonfiguration in der Bindung mit sich selbst ist hier ein entscheidender Faktor. Die Elemente der vierten Hauptgruppe können diese durch Atombindungen erreichen. -> Bor zum Bsp. hat zu wenig Außenelektronen (kommt bei B-B Bindung nur auf 6). N und O haben schon wieder zu viele (10, 12). Diese freien Elektronenpaare machen dann 'Unfug'. Was ist dann aber mit Si?

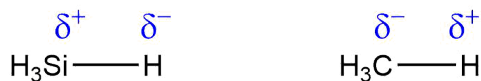


Abbildung 7.1: Si und C im Vergleich

Silicium ist weniger elektronegativer als Kohlenstoff. Dadurch ist Silicium leichter angreifbar wie zum Beispiel von Lewis Basen. So ist auch die Si-Si Bindung weniger stabil, als die Si-O Verbindung. Alles wird also fleißig zu  $\text{SiO}_2$  oxidiert. Auch Kohlenstoffverbindungen würden aus thermodynamischer Sicht oxidiert werden, dies ist jedoch aus kinetischer Sicht ungünstiger. Somit bleibt das Plastik, wie PET, in den Weltmeeren wohl noch ein bisschen erhalten.

## 7.3 PSE der Organischen Chemie

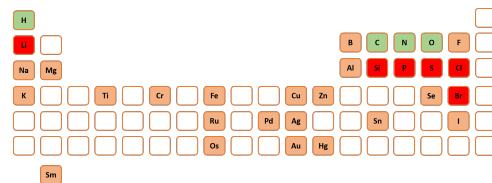


Abbildung 7.2: PSE der Organischen Chemie

## 7.4 Stoffklassen

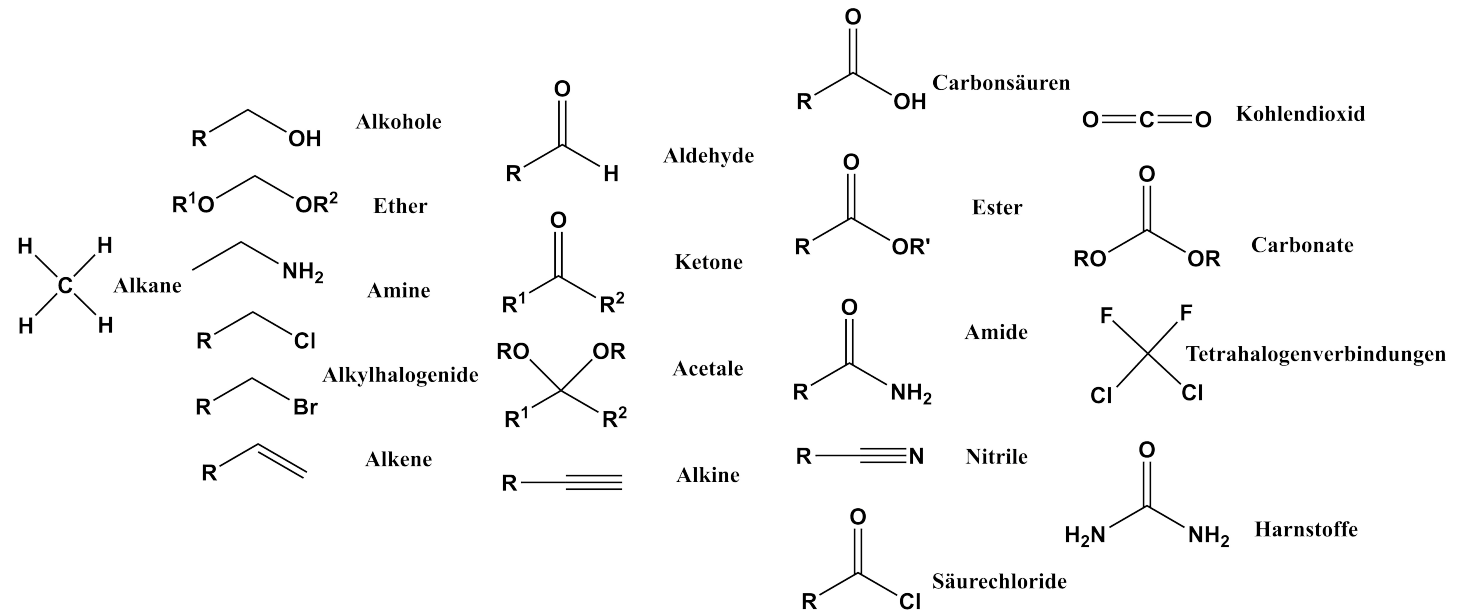


Abbildung 7.3: Zusammenfassung der Stoffklassen



## 7.5 Benennung von Verbindungen

siehe Tafel...

## 7.6 Beschreibung von Reaktionen

### 7.6.1 Nucleophile und Electrophile

Das Bestimmen von Nucleophil und Electrophil ist sehr wichtig, um im nächsten Schritt den Reaktionsverlauf beschreiben zu können!

- **Nucleophile** sind kernliebend, sie besitzen energiereiche besetzte MOs.
- **Electrophile** sind elektronliebend, sie besitzen unbesetzte energiarmer MOs.

### 7.6.2 Neutrale Nucleophile

Am Häufigsten sind hier Nucleophile, die ein nichtbindendes freies Elektronenpaar haben. Beispiele für neutrale Nucleophile sind: Ammoniak, Amine, Wasser, Alkohole. So gibt es auch Nucleophile mit einem freien Elektronenpaar in  $sp^3$ -Hybridorbitalen, wie Phosphine und Thiole.

### 7.6.3 Anionische Nucleophile

Bei anionischen Nucleophilen kommt es zu einer elektrostatischen WW zu positiv geladenen Electrophilen. Gewöhnlich sind das O, S oder Halogene. Beispiele hierfür wären:  $OH^-$ ,  $Br^-$ ,  $CN^-$ .

### 7.6.4 Nucleophile ohne nichtbindendes $e^-$ – Paar

Auch bindende  $\pi$ -Elektronen können eine Rolle spielen, so sind Alkene schwache Nucleophile. Sie können aber auch Electrophile sein. Dies hängt jeweils von den Substituenten ab.

### 7.6.5 Electrophile

Electrophile sind meistens positiv oder neutral geladen. Sie besitzen ein freies 'Orbital', wie z.B. p-Orbital von Boran. Andere wiederum besitzen kein freies leeres Atomorbital  $\rightarrow$  vielmehr LUMOs. Die Energie wird von elektronegativeren Atomen / Bindungspartnern beeinflusst und energetisch abgesenkt (vgl. MO Schema zwischen untersch. Atomtypen).

## 7.7 Reaktionen beschreiben

Die Beschreibung von Reaktionen und damit verbundenen Änderungen der Bindungen (bildliche Verschiebung von Elektro-

nen(paaren)) geschieht mittels gebogener Reaktionspfeile  $\curvearrowright$ . Diese beginnen immer an einem Elektronenpaar. Die Ladung muss immer erhalten bleiben. Für die Bewegung einzelner Elektronen, wie bei radikalischen Reaktionen benutzt man Pfeile mit halber Pfeilspitze.



Abbildung 7.4: Reaktionen beschreiben 1

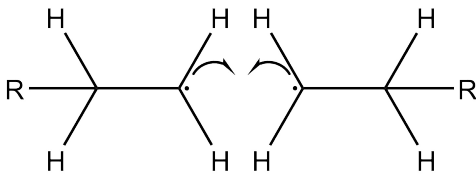


Abbildung 7.5: Reaktionen beschreiben 2

Beim Zeichnen der Reaktion ist auch die Orientierung wichtig, so kann der Pfeil auch durch Atome 'gezeichnet' werden, um zu definieren an welchem Atom eine neue Bindung entsteht. Es ist zudem wichtig, immer die maximalen Valenzen zu überprüfen, zum Bsp. kein fünfbindiger Kohlenstoff.

## 7.8 Konfiguration & Konformation & Stereochemie

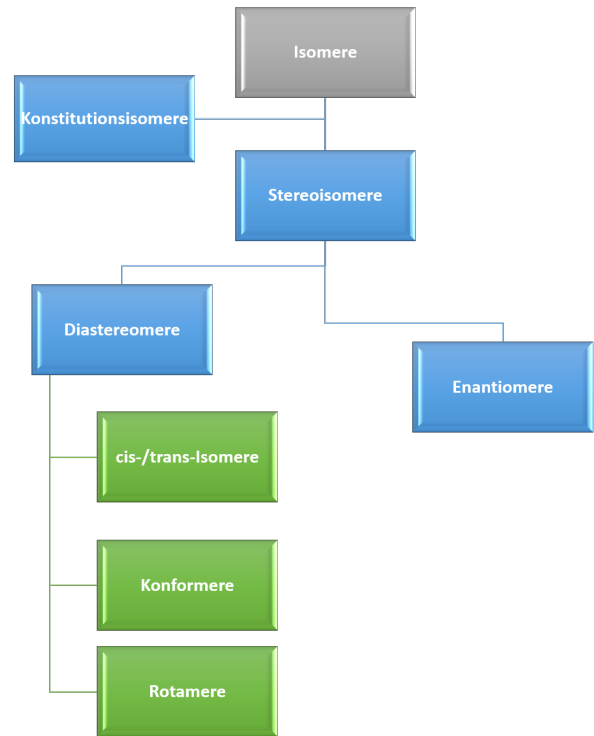


Abbildung 7.6: Isomere (Typen)

- Konstitutionsisomere sind Verbindungen, die aus der gleichen Anzahl und des gleichen Typs Atome aufgebaut und nur auf unterschiedliche Weise verknüpft sind.
- Stereoisomere
  - Diastereomere sind Isomere,

die sich nicht wie Bild und Spiegelbild zueinander verhalten.

\* cis-/trans Isomere

\* Konformere: Eine Konformation kann ohne Bindungsbruch in eine andere überführt werden  
 -> Rotation um Einfachbindungen  
 (Rotamer)

\* Rotamere

- Enantiomere sind Isomere, die sich wie Bild und Spiegelbild zueinander verhalten.

### 7.8.1 Beschreibung der Konfiguration

#### Cahn-Ingold-Prelog(CIP)-Konvention

für Kohlenstoff als Zentrum mit vier verschiedenen Substituenten; Für die Bestimmung von R und S wird zunächst eine 'Rangordnung' an Substituenten erstellt (1-4). Je höher die Ordnungszahl des Substituenten desto besser der Rang / bei gleicher OZ entscheidet der nächstgebundene usw. Der Substituent mit dem niedrigsten Rang muss hinter der Tafel Ebene liegen (von uns weg)-> Molekül drehen. Nun entlang der Prioritäten wandern. Wenn Prioritäten im Uhrzeigersinn angeordnet sind, dann erhält man R und wenn gegen den Uhrzeigersinn dann S.



Abbildung 7.7: Die absolute Konfiguration bestimmen.

### 7.8.2 Chiralität

Zwei Enantiomere Verbindungen besitzen zunächst gleiche Siedepunkte, Schmelzpunkte sowie in vielerlei Hinsicht gleiche Spektren. Es gibt aber auch Unterschiede. So können chirale Verbindungen anhand der Drehung von linear polarisiertem Licht unterschieden werden. Das Enantiomer welches die Polarisations ebene des Lichtes nach rechts dreht wird als **(+)-Enantiomer** bezeichnet. Wenn die Polarisations ebene des Lichtes nach links gedreht wird dann als **(-)-Enantiomer**. Dies ist unabhängig von R und S, der absoluten Konfiguration. Die physikalischen und chemischen Eigenschaften von Enantiomeren sind bis auf den Drehwert gleich -> für **Diastereomere** ist dies nicht der Fall.  
 -> **unterschiedliche physikalische und chemische Eigenschaften**

### 7.9 Reaktionstypen

- Substitutionen

- Eliminierungen
- Umlagerungen
- Additionen