



Allgemeine und Anorganische Chemie

- Einführung -

Gergely Rozsa • Stefan Lebernegg

Was ist Naturwissenschaft?

Naturwissenschaften beschäftigen sich, wieder der Name schon andeutet, mit der Natur. Darunter sind nicht nur dichte Wälder und grüne Wiesen zu verstehen, sondern alles, was unser Leben bestimmt. Zu den drei klassischen Naturwissenschaften gehören die **Biologie**, **Physik** und **Chemie**. Zu den angewandten können die Medizin und die Ingenieurwissenschaften Bauwesen, Maschinenbau, Elektrotechnik, usw. gezählt werden.

Was ist Chemie?

Jede der drei ursprünglichen Disziplinen hat ihren eigenen Schwerpunkt, den sie experimentell untersucht und Beobachtungen sowie gewonnene Ergebnisse zu deuten versucht. So steht bei der Biologie die sogenannte „**belebte Natur**“, sprich Tiere und Pflanzen, aber auch Mikroorganismen, im Vordergrund. Dagegen dreht sich in der Physik und Chemie alles um die „**unbelebte Natur**“. Hierbei versucht die Physik **Zustände und Zustandsänderungen** zu verstehen. Das heißt Temperatur, Magnetismus, Energie, Elektrizität, usw. Wenn also eine Kugel vom Tisch auf den Boden fällt, ist das ein rein physikalisches Phänomen. Die Kugel hat ihren Zustand geändert, denn sie befindet sich nach dem Fall nicht mehr auf der gleichen Höhe. Sie hat ihre Höhenenergie in Bewegungsenergie umgewandelt. Für den Chemiker ist solch ein Versuch außerordentlich uninteressant, denn die Kugel besteht immer noch aus derselben Verbindung wie zuvor. Chemisch ist also nicht passiert. Für ihn sind Experimente nur dann von Bedeutung, wenn es dabei um **Stoffe und Stoffveränderungen** geht. Doch was sind Stoffe? Woraus bestehen sie und wie reagieren sie „aufeinander“ bzw. miteinander? Gibt es hierfür Gesetzmäßigkeiten? Die letzte Frage ist eindeutig mit „ja“ zu beantworten. Aber der Reihe nach. Im Folgenden sollen einfache Grundlagen der Chemie aber auch Gefahren, die sie birgt, für jedermann erläutert werden. Hierfür fangen wir entsprechend mit Sicherheitsbestimmungen und Gefahrensymbolen an, die viele Flaschen, Behälter und andere Gebinde von Chemikalien prägen.

Sicherheit in der Chemie

Für Arbeiten in einem Chemielabor sowie beim Umgang mit Chemikalien, sogenannten Gefahrstoffen, ist es außerordentlich wichtig, sich vorab mit den Gefahren, die von Substanzen ausgehen können, vertraut zu machen. Allgemein werden die Risiken über Symbole auf den zugehörigen Flaschen und Behältern dargestellt, die auf verschiedene Eigenschaften des Inhalts hinweisen. *Abbildung 1* zeigt eine Zusammenfassung der Gefahrenkennzeichen nach dem **GHS-System**, dem *Global Harmonized System*.



Abbildung 1: Gefahrensymbole nach dem GHS-System (*Global Harmonized System*). Explosionsgefahr (GHS01), leicht entzündbar (GHS02), brandfördernd (GHS03), Gas unter Druck (GHS04), ätzend/korrosiv (GHS05), giftig (GHS06), reizend (GHS07), gesundheitsschädlich/krebserregend (GHS08) und umweltgefährlich/-schädlich (GHS09).

Viele Lösemittel der Organischen Chemie sind aufgrund ihres niedrigen Flammpunktes leicht entzündbar (GHS02) und sind daher in speziellen Schränken und Schubladen aufzubewahren, die sich im Brandfall automatisch selbst verschließen. Sogenannte Oxidationsmittel, die im Skript [Redox-Reaktionen in Chemie und Technik](#) genauer beleuchtet werden, wirken als Brandverstärker (GHS03) und sind daher vor Hitze, offenen Flammen, heißen Oberflächen und anderen Zündquellen zu schützen. Neben den Gefahren von verflüssigten Gasen, die in Stahlflaschen bei einem Druck von bis zu 200 bar gelagert werden (GHS04), aber auch Materialien, die wegen ihrer raschen Zersetzung als explosiv gelten (GHS01), passieren kleinere Laborunfälle durch Verätzungen (GHS05) bei der Arbeit mit Säuren und Basen oder Reizungen und Irritationen in Augen und auf der Haut (GHS07). Das System nach GHS unterscheidet hinsichtlich Toxizität zwischen „giftig“ (GHS06), womit akute Lebensgefahr durch Einatmen, Hautresorption oder Inkorporation (Verschlucken) gemeint ist, und „gesundheitsschädlich“ (GHS08), was auf Kanzerogenität (Krebserregender Stoff) sowie Mutagenität (Erbgutschädigung) abzielt. Eine Liste aus **H-Sätzen** (engl.: *hazard*, Gefährdung) kategorisiert die Risiken stufenweise nach physikalischen Gefahren, Gesundheitsgefahren und Umweltgefahren. Ergänzend dazu geben **P-Sätze** (engl.: *protection*, Schutz) Verhaltensregeln für die Handhabung der Substanzen. Grundsätzlich sollte ein funktionierendes Chemielabor zunächst über eine Raumlüftungsanlage mit definierter Zu- und Abluftmenge sowie mehrere Abzüge für Experimente mit Gasen, Rauch, Dämpfen und Aerosolen verfügen. Darüber hinaus spielt die persönliche Schutzausrüstung eine große Rolle. Die Gebotszeichen hierfür sind in [Abbildung 2](#) zusammengestellt.



Abbildung 2: Gebotszeichen für Schutzmaßnahmen in der Arbeit mit Gefahrstoffen: Schutzbrille (1), Schutzanzug (2), Fußschutz (3), Staubschutzmaske (4) und Schutzhandschuhe (5).

Schutzbrille und -kittel, teilweise auch Labormantel genannt, dürfen unter keinen Umständen fehlen und sind in einem Labor stets zu tragen. Geschlossenes und festes Schuhwerk gewährleistet Rutschfestigkeit und Schutz vor Glasscherben oder Chemikalien auf dem Fußboden, das heißt Sandalen und ähnliches sind in Laboratorien unzuweckmäßig. Eine Staubschutzmaske ist insbesondere dann zu verwenden, wenn das Einatmen von feinsten Staubpartikeln oder Aerosolen verhindert werden soll. Zu guter Letzt dienen Schutzhandschuhe der Vermeidung von Kontakt mit Gefahrstoffen durch die Hände. Dabei ist jedoch zu beachten, dass diese aus verschiedenen Polymeren gefertigten Einmalhandschuhe (Nitril oder Latex) unterschiedliche Durchlässigkeit für diverse Substanzen haben. Darüber hinaus müssen sie regelmäßig gewechselt werden, damit die Haut nicht zu sehr aufweicht und somit anfälliger für die Aufnahme von Chemikaliendämpfen wird. Für den Gebrauch von konzentrierten Säuren und Basen sind eigens hierfür vorgesehene Säurehandschuhe aus dickerem Kunststoff erhältlich, ebenso gibt es Spezialhandschuhe für Arbeiten bei hohen Temperaturen. Körperstellen, die durch den Schutzkittel nicht abgedeckt werden, sollten durch die eigene Kleidung geschützt sein. Das bedeutet, dass neben geschlossenen Schuhen auch lange Hosen und T-Shirts oder Hemden bis mindestens zum unteren Halsbereich getragen werden müssen. Zu grundsätzlichen Schutzmaßnahmen neben der persönlichen Ausrüstung zählt auch, dass der Transport von Gefahrstoffen, vor allem in Glasflaschen, immer in entsprechenden Transportbehältern (großen Eimern) zu erfolgen hat, damit ein Herunterfallen und eine damit verbundene unbeabsichtigte Freisetzung verhindert wird. Das Konsumieren und Aufbewahren von Lebensmitteln im Labor ist untersagt. Während des Versuchs ist auf ein sauberes Arbeiten zu achten. Chemikalienbehälter und -gebilde werden nur für die Dauer der Entnahme geöffnet und danach sofort wieder verschlossen. Zum Herausnehmen müssen Laborgeräte, besonders Spatel und Löffel rein sein, um eine Vermischung mehrerer Substanzen vorzubeugen. Vor dem Experiment sind Gefährdung und daraus abzuleitende Schutzmaßnahmen für die einzelnen Gefahrstoffe zu studieren. Hierfür stehen im Chemielabor sogenannte **Betriebsanweisungen** zur Verfügung, genauer gesagt ein Katalog, der für jede Substanz H- und P-Sätze, Verhaltensregeln im Gefahrfall und Tätigkeiten als Ersthelfer aufführt. Sind alle Vorsorgemaßnahmen getroffen, steht einem erfolgreichen und spannenden Experimentieren nichts mehr im Wege.

Atombau – Das Bohr'sche Atommodell

Stoffe, die Bestandteil der vertrauten Materie sind, sind aus kleinsten Teilchen, den **Atomen**, aufgebaut. Nach der Vorstellung von Ernest RUTHERFORD und gemäß dem **Bohr'schen Atommodell** bestehen diese selbst aus einer **Atomhülle**, in der sich **einfach negativ geladene Elektronen** auf wohl definierten **Schalen**, ähnlich „Bahnen“, befinden oder „kreisen“ und einem **Atomkern**, den sie abschirmen und der wiederum aus **einfach positiv geladenen Protonen** und **neutralen Neutronen** zusammengesetzt ist. Ein Atom hat stets genauso viele Elektronen wie Protonen, damit sich die Ladungen aufheben! [Abbildung 3](#) gibt ein Beispiel für den Atombau schematisch wieder.

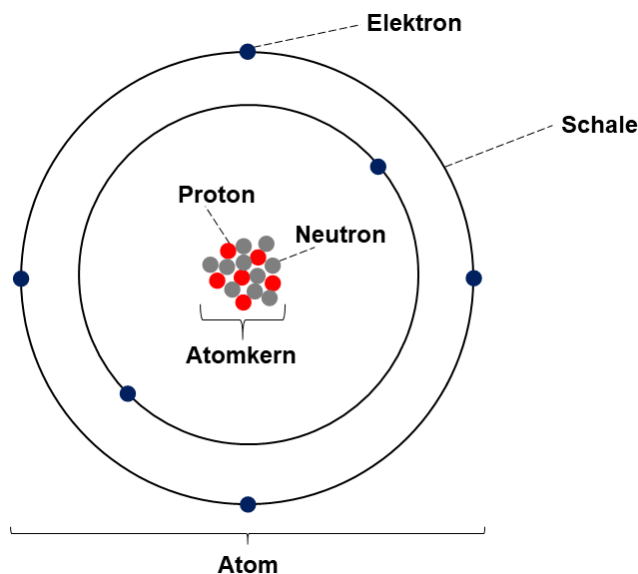


Abbildung 3: Schematische Darstellung eines Atoms nach dem Bohr'schen Atommodell.

Atome können Elektronen abgeben und aufnehmen. Weicht die Zahl der Elektronen von der der Protonen ab, ist aus dem Atom ein **Ion** mit elektrischer Ladung geworden. Ein Ion mit weniger Elektronen als Protonen im Kern ist positiv geladen, man spricht von einem **Kation**, da es sich in Lösung und einem angelegten elektrischen Feld zur Kathode bewegt. Dagegen liegt bei einem Überschuss an Elektronen ein sogenanntes **Anion**, ein folglich negativ geladenes Ion, vor. Für die Ionisation kommen weniger kernnahe Elektronen als vielmehr die der äußersten Schalen in Frage, sodass diese die chemischen Eigenschaften eines Atoms bestimmen und **Valenzelektronen** genannt werden. Atome mit gleicher Elektronen- und Protonenzahl gehören zum gleichen **chemischen Element**, Atomkerne mit einer definierten Zahl an Neutronen und Protonen heißen **Nuklide**. Unterscheiden sie sich dagegen in der Zahl der Neutronen, die Masse des Atoms nimmt quasi zu, so heißen sie **Isotope**. Chemische Elemente mit mehreren Isotopen, wie beispielsweise Kohlenstoff mit ^{12}C , ^{13}C und ^{14}C , werden als **Mischelemente** bezeichnet, Elemente, bei denen keine Isotope auftreten, wie zum Beispiel bei Fluor ^{19}F , als **Reinelemente**. Es ist allerdings zu beachten, dass das Bohr'sche Atommodell nur für das Element Wasserstoff gültig ist, dessen Atom lediglich aus einem Elektron und einem Proton aufgebaut ist. Darüber hinaus müssen Orbitale betrachtet werden, die im Folgenden näher erläutert werden sollen.

Chemische Elemente und Verbindungen

Wie im vorangegangenen Kapitel bereits angesprochen, bilden Atome gleicher Elektronen- und Protonenzahl ein **chemisches Element**. Ferner gilt die Forderung, dass es sich durch chemische Methoden, wie Destillation, Chromatographie, Filtration oder Kristallisation nicht weiter zersetzen lässt. Chemische Elemente können atomar vorliegen, wie beispielsweise die Edelgase Helium, Neon, Argon, Xenon, usw. Andererseits treten sie auch molekular auf. Solche **Elementmoleküle** findet man bei Wasserstoff (H_2), Stickstoff (N_2), Sauerstoff (O_2) sowie in der Gruppe der Halogene mit Fluor (F_2), Chlor (Cl_2), Brom (Br_2) und Iod (I_2). Die reaktivste Form von Phosphor ist der weiße Phosphor,

der aus P₄-Molekülen aufgebaut ist. Schwefel zeigt ringförmige Einheiten aus einer unterschiedlichen Zahl an Atomen, sodass hier häufig die Formel S_x verwendet wird. Chemische Elemente sind im **Periodensystem der Elemente** (kurz: **PSE**) systematisch geordnet. Eine vereinfachte Darstellung ist aus *Abbildung 4* zu entnehmen.

Perioden	Gruppen																	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Xe
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Kr
6	Cs	Ba	*)	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	**)	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

Hauptgruppen
Nebengruppen
Hauptgruppen

*) La - Lu
**) Ac - Lr

Abbildung 4: Periodensystem der chemischen Elemente mit Haupt- und Nebengruppen.

Es handelt sich hierbei im Grunde genommen um eine Tabelle, in der die Elemente mit steigender Elektronenzahl von links nach rechts aufgelistet werden. Eine Zeile wird als **Periode** bezeichnet. Elemente mit der gleichen Anzahl an Valenzelektronen kommen in eine **Gruppe**, die die Spalten darstellen. So besitzen alle in der ersten Gruppe ein äußerstes Elektron und werden Alkalimetalle genannt. Die zweite Gruppe heißt Erdalkalimetalle, die 13. Bor-Gruppe, die 14. Kohlenstoff-Gruppe oder Tetrele, die 15. Pnictogene oder Pnictogene, die 16. Chalcogene (*lat.* Erzbildner), die 17. Halogene (*lat.* Salzbildner) und die 18. schließlich Edelgase. Früher wurde das Periodensystem unterteilt in **Haupt-** und **Nebengruppen**. Heute stellen die Gruppen 1, 2, 13, 14, 15, 16, 17 und 18 zwar immer noch die **Hauptgruppen** dar, die Nebengruppen (3 bis 12) wurden jedoch durch den Begriff der **Übergangselemente** ersetzt. Neben dem Elementsymbol, das sich weitestgehend aus dem Lateinischen oder Griechischen oder gar von Namen berühmter Naturwissenschaftler ableiten lässt, sind weitere Zahlenangaben zu finden, unter denen die Masse des betreffenden Elements und die Gesamtelektronenzahl die wichtigsten sind. *Abbildung 5* veranschaulicht, wo diese im PSE zu finden sind.

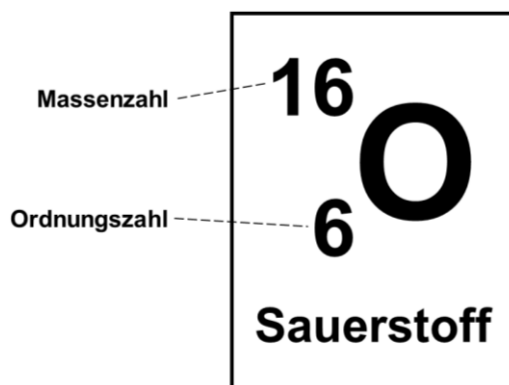


Abbildung 5: Elementsymbol von Sauerstoff mit Massen- und Ordnungszahl.

Dabei ist die Elektronenzahl des Elements gleichzeitig seine **Ordnungszahl** im Periodensystem und die darüber befindliche als Angabe seiner Masse seine **Massenzahl**. Das Element Sauerstoff aus [Abbildung 5](#) ist demzufolge aus 6 Elektronen in der Atomhülle und 6 Protonen im Atomkern aufgebaut. Mit einer Massenzahl von 16 a.u. (*atomic units*) und abzüglich der Masse der Protonen kommen im Kern noch 10 Neutronen hinzu. Definitionen der Massen von Atomen und Verbindungen werden in den folgenden Kapiteln aber noch ausführlich erläutert. Elemente sind bestrebt durch chemische Reaktionen ihre Elektronenkonfiguration in die eines Edelgases zu verwandeln und gehen hierfür mit anderen Elementen sogenannte **Verbindungen** ein. Formal besitzen nach der Gruppennummer im PSE die Edelgase acht Valenzelektronen, man spricht von einem **Elektronen-Oktett**. Das Verlangen anderer Elemente diesen Zustand zu erreichen wird durch die **Oktett-Regel** beschrieben. Werden für die Edelgaskonfiguration Elektronen abgegeben, liegt ein **Metall** vor. Nimmt ein Element dagegen Elektronen auf, gehört es zu den **Nichtmetallen**. Natrium Na, beispielsweise, ist ein Alkalimetall mit einem Valenzelektron. Gibt es dieses ab, so erreicht Na die Elektronenkonfiguration von Neon Ne. Anders sieht es bei Chlor Cl aus, das zu den Halogenen zählt. Mit sieben Valenzelektronen muss es noch ein weiteres Elektron aufnehmen, um das Oktett von Argon Ar zu erlangen. Der Aufbau von chemischen Verbindungen heißt **Synthese**, die Umkehrung wird **Analyse** genannt. Eine chemische Reaktion wird grundsätzlich durch eine **Reaktionsgleichung** in Pfeilschreibweise ausgedrückt.

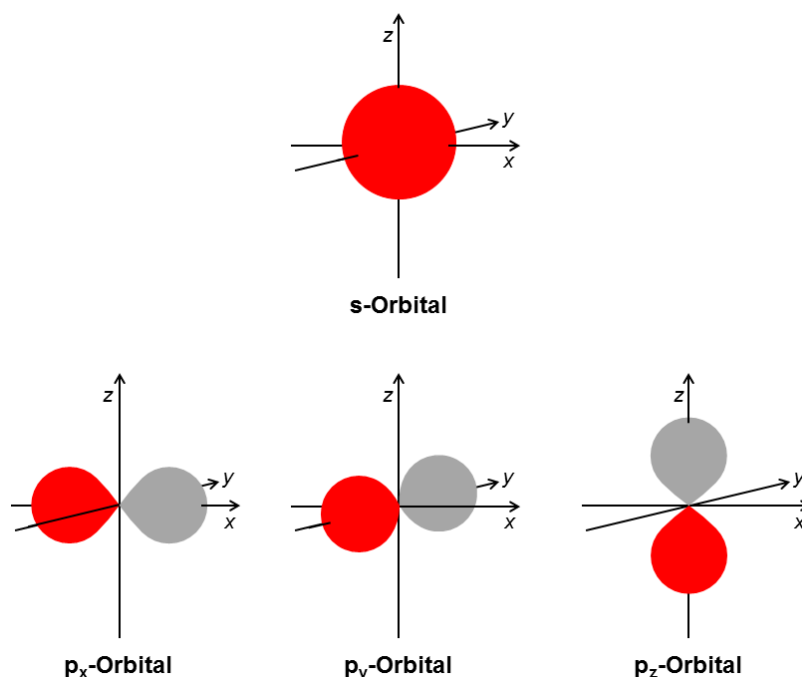


A und B dienen als Ausgangsstoffe und heißen **Edukte**, während C die Endverbindung abbildet und **Produkt** heißt, wobei nach einer Reaktion auch mehrere Produkte nebeneinander entstehen können.

Die Theorie der Atom- und Molekülorbitale

Durch die Entwicklung der Quantenmechanik (Wellenmechanik), insbesondere mit der Arbeit von Erwin **SCHRÖDINGER** (Schrödinger-Gleichung) und Werner **HEISENBERG** (Unschärferrelation), wurde die Vorstellung von Atomen nach RUTHER-

FORD und BOHR abgelöst. Unter Berücksichtigung der Natur des Elektrons, sowohl ein Teilchen zu sein, aber auch Eigenschaften einer Welle zu besitzen, lieferten letztlich das sogenannte Orbitalmodell, das uns heute noch hilft, chemische Reaktionen zu erklären und Eigenschaften von Molekülen, wie Struktur oder diverse Spektren von analytischen Methoden in der Chemie, zu berechnen. Die Modellvorstellung von Orbitalen ist im Grunde genommen ein mathematisches Konstrukt, das uns räumlich visualisiert, wo sich Elektronen am wahrscheinlichsten aufhalten. Einen Überblick über das Aussehen der s- und p-Orbitale gibt [Abbildung 6](#).



[Abbildung 6](#): Qualitative, räumliche Darstellung der s- und p-Orbitale.

Das s-Orbital weist eine Kugelsymmetrie auf, die p-Orbitale dagegen zeigen „hantelförmig“ in die drei Raumrichtungen x, y und z. Sie enthalten eine Knotenebene, die sich in etwa mit der Knotenebene einer stehenden Welle vergleichen lässt. Diese teilt ein p-Orbital in zwei Orbitallappen mit verschiedenen Vorzeichen auf, die in [Abbildung 6](#) mit den Farben rot und grau gekennzeichnet sind. Für eine Bindung müssen jeweils rote mit roten und graue mit grauen Orbitallappen kombiniert werden. Dann entstehen aus den **Atomorbitalen** (AO: s, p_x , p_y , p_z) nach der **LCAO-MO-Theorie** (engl.: *linear combination of atomic orbitals to molecular orbitals*) **bindende Molekülorbitale** (MO). Umgekehrt bilden rot-graue-Kombinationen **antibindende Molekülorbitale**. Am Beispiel des Wasserstoff-Moleküls H_2 sieht dies wie in [Abbildung 7](#) aus.

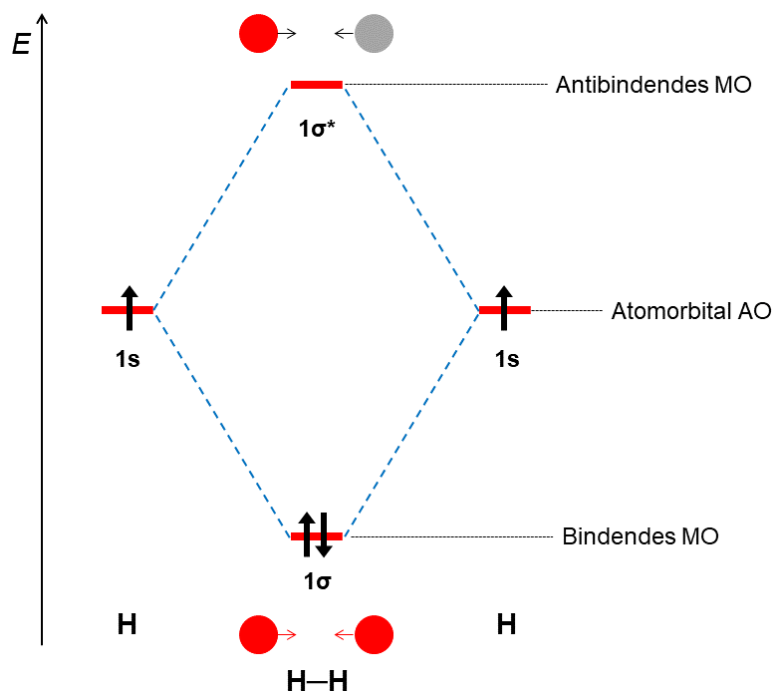


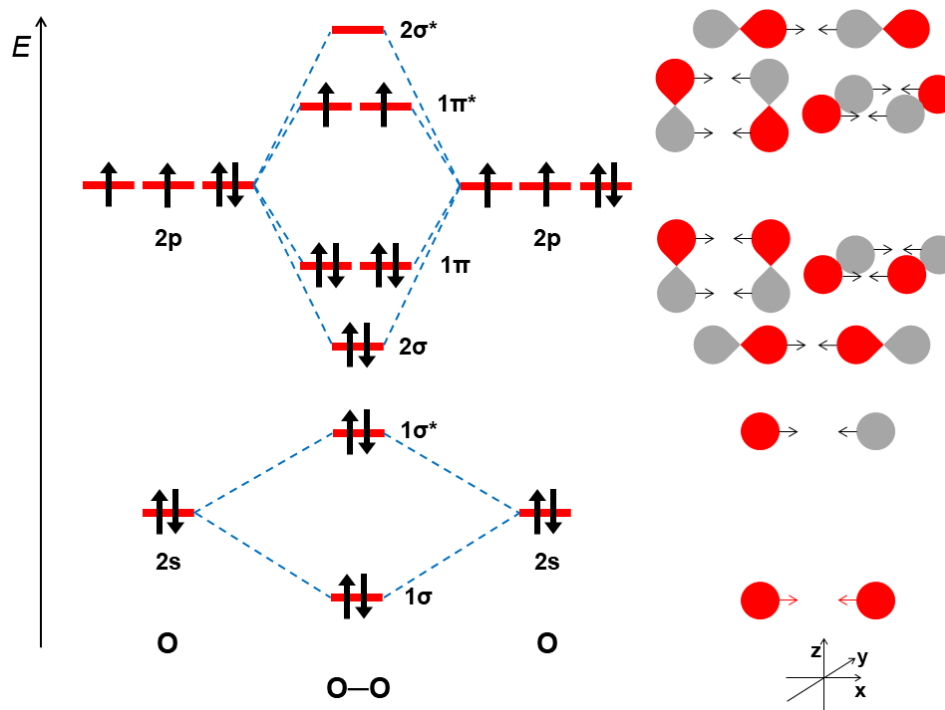
Abbildung 7: Qualitative Darstellung der energetischen Auftragung von Molekülorbitalen im Wasserstoff-Molekül H_2 .

Das 1s-Orbital eines Wasserstoffatoms ist mit einem Elektron besetzt. Kombiniert man nun zwei 1s-Orbitale zweier Wasserstoffatome mit gleichen Vorzeichen, so entsteht ein bindendes Molekülorbital, das eine **Rotationssymmetrie entlang der Bindungsachse** aufweist und daher als **σ -Bindung** oder als **σ -Molekülorbital** (in *Abbildung 7*: 1σ) bezeichnet wird. Dieses liegt im Vergleich mit den Atomorbitalen energetisch niedriger, man sagt auch stabilisiert. Analog zur bindenden Variante ergibt die Kombination von zwei 1s-Orbitalen mit unterschiedlichen Vorzeichen ein antibindendes Molekülorbital σ^* , das im Gegensatz zu den Atomorbitalen eine höhere potentielle Energie zeigt und damit energetisch destabilisiert ist. Für das Wasserstoff-Molekül H_2 wurden aus zwei 1s-Orbitalen zwei Molekülorbitale, nämlich σ und σ^* , gebildet. Allgemein gilt für die Aufstellung von Molekülorbitalen, dass aus einer beliebigen Zahl n an Atomorbitalen genauso viele, also wieder n Molekülorbitale kombiniert werden müssen. Die Besetzung von Molekülorbitalen mit Elektronen erfolgt nach dem gleichen Prinzip, wie bei Atomorbitalen (s, p, d). Zunächst werden die Orbitale mit der niedrigsten Energie mit Elektronen befüllt. Dabei erhalten energetisch entartete Orbitale, d. h. Orbitale mit gleicher Energie, zuerst ein Elektron (**Hund'sche Regel**) und erst danach kommt pro Orbital noch ein weiteres Elektron mit entgegengesetztem Spin hinzu (**Pauli-Verbot**). Sind Orbitale niedrigerer Energien voll, werden Orbitale höherer Energien nach der gleichen Vorgehensweise befüllt. Aus Molekülorbitalen kann aus den bindenden und antibindenden Zuständen die **Bindungsordnung**, ob eine Einfach-, Doppel- oder Dreifachbindung in einem Molekül vorliegt, berechnet werden. Dazu wird als erstes die Differenz aus der Summe der Zahl der Elektronen in bindenden N_b und der Summe der Zahl der Elektronen in antibindenden Orbitalen N_a gebildet und diese schließlich durch zwei dividiert, kurz:

$$\text{Bindungsordnung} = \frac{\sum N_b - \sum N_a}{2} \quad (\text{Gl. 2})$$

Für das Wasserstoff-Molekül erhält man mit zwei Elektronen in 1σ und einem leeren $1\sigma^*$ -MO eine Bindungsordnung von eins und formuliert damit eine Einfachbindung zwischen den beiden H-Atomen. Etwas aufwändiger, aber keineswegs

komplizierter ist das MO-Schema des Sauerstoff-Moleküls O_2 . Die Vorgehensweise ist dieselbe wie bei H_2 . Der einzige Unterschied, neben s-Orbitalen tragen nun auch p-Orbitale entscheidend zur Bindung bei. Das Ergebnis der sogenannten Linearkombination der Atomorbitale von Sauerstoffatomen zeigt [Abbildung 8](#).



[Abbildung 8](#): Qualitative Darstellung der energetischen Auftragung von Molekülorbitalen im Sauerstoff-Molekül O_2 .

Die energetisch tiefer liegenden 2s-Orbitale liefern wieder ein bindendes (1σ) und ein antibindendes MO ($1\sigma^*$). Bei den drei entarteten p-Orbitalen ist nun aufgrund ihrer räumlichen Ausdehnung die Bindungsrichtung zu beachten. In [Abbildung 8](#) wird die Bindung zwischen den O-Atomen in x-Richtung gebildet. Damit ergeben zwei p_x -Orbitale ein rotationssymmetrisches, bindendes (2σ) und entsprechend antibindendes ($2\sigma^*$) Molekülorbital. Die beiden **bezüglich der Bindungsachse x achsensymmetrischen p_y - und p_z -Orbitale** können zu jeweils zwei entarteten bindenden (1π) und antibindenden ($1\pi^*$) **π -Molekülorbitalen** kombiniert werden. Die Besetzung der MO mit Elektronen nach Hund'scher Regel und Pauli-Prinzip überrascht mit zwei ungepaarten Elektronen im π^* -Orbital. Das Sauerstoff-Molekül ist im Grundzustand ein **Diradikal** und folglich **paramagnetisch**, was auch mit dem Experiment, bei dem eine mit Sauerstoff durchflutete Röhre in ein homogenes Magnetfeld hineingezogen wird, im Einklang steht. Für die Bindungsordnung erhalten wir gemäß

$$\text{Bindungsordnung}(O_2) = \frac{2(1\sigma) + 2(2\sigma) + 4(1\pi) - 2(1\sigma^*) - 2(1\pi^*)}{2} = \frac{8 - 4}{2} = 2 \quad (\text{Gl. 3})$$

eine Doppelbindung. Neben bindenden und antibindenden Orbitalen gibt es auch nicht bindende, die keinen Beitrag zur Bindungsordnung leisten. Sie kommen vor, wenn bei einem Bindungspartner eines zweiatomigen Moleküls keine p-Orbitale zur Verfügung stehen, wie dies bei Chlorwasserstoff der Fall ist. Die energetische Auftragung der MO von HCl ist [Abbildung 9](#) zu entnehmen.

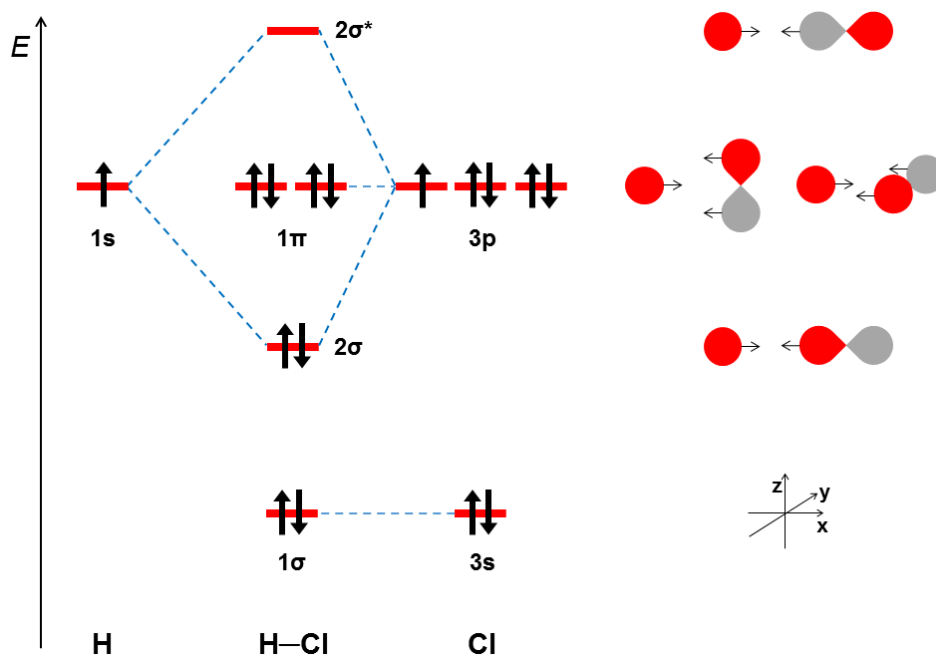


Abbildung 9: Qualitative Darstellung der energetischen Aufspaltung von Molekülorbitalen (MO) im Chlorwasserstoff-Molekül HCl.

Die Valenzelektronen des Wasserstoffatoms befinden sich im 1s-Orbital, beim Chloratom im 2s-Orbital und den drei 2p-Orbitalen. Aufgrund der größeren Ausdehnung von $2p_x$, $2p_y$ und $2p_z$ nimmt das 2s-Orbital an der Wechselwirkung mit dem 1s-Orbital des H-Atoms so gut wie nicht teil und trägt alleine zu einem nicht bindenden MO (1σ) bei. Dagegen können die drei p-Orbitale mit 1s des Wasserstoffatoms zu einem bindenden (2σ) und einem antibindenden Molekülorbital ($2\sigma^*$) sowie zwei **nicht bindenden MO** (1π) kombiniert werden. Letztere kommen insbesondere dadurch zustande, dass durch die Überlappung zwischen 1s des H-Atoms und dem $2p_z$ - oder $2p_y$ -Orbital des Chloratoms senkrecht zur Bindungsachse gleich große bindende und antibindende Wechselwirkungen entstehen, die sich gegenseitig aufheben und folglich nicht zur Bindung beitragen. Die Bindungsordnung im HCl-Molekül lässt sich aus den Elektronenzahlen in 2σ und $2\sigma^*$ zu 1 bestimmen und definiert damit die erwartete Einfachbindung.

Quantenzahlen – der Grund für $\uparrow$ oder $\downarrow$

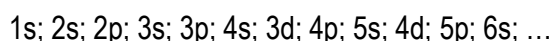
Aus der Quantisierung der Energiezustände von Elektronen können aus der Quantenmechanik sowohl in Theorie als auch experimentell vier verschiedene sogenannte Quantenzahlen gefolgert werden. Die **Hauptquantenzahl** n mit $n = 1; 2; 3; \dots$ gibt im Wesentlichen die von BOHR postulierte „Schale“ des Elektrons an, was in der Orbitaltheorie den s-Orbitalen entspricht. Die **Nebenquantenzahl** l definiert, ob es neben s-Orbitalen noch weitere gibt, wie p- oder d-Orbitale. Dabei gilt für l : $l = 0; 1; 2; \dots; (n - 1)$. Die **Orientierungsquantenzahl** m_l gibt Information darüber, wie viele es von den zusätzlichen p- oder d-Orbitalen gibt. In Abhängigkeit von l setzt sich m_l aus $m_l = -l; \dots; -2; -1; 0; 1; 2; \dots; +l$ zusammen. Ein Element der zweiten Periode beispielsweise besitzt mit $n = 2$ ein 2s-Orbital, und mit $l = 0; 1$ auch p-Orbitale. Die Orientierungsquantenzahl besagt, dass es mit $m_l = -1; 0; +1$ drei energetisch entartete (gleichwertige) p-Orbitale gibt.

Tabelle 1 fasst die Beziehung zwischen Haupt-, Neben- sowie Orientierungsquantenzahl, Orbitalen und Schalen zusammen.

Tabelle 1: Beziehung zwischen Haupt-, Neben- sowie Orientierungsquantenzahl, Schalen und Orbitalen.

	0	1	2	3
<i>n</i>		K	L	M
<i>l</i>	s	p	d	f
<i>m_l</i>	0 1 s-Orbital	-1; 0; 1 3 entartete p-Orbitale	-2; -1; 0; 1; 2 5 entartete d-Orbitale	-3; -2; -1; 0; 1; 2; 3 7 entartete f-Orbitale

Die vierte Quantenzahl, die **Spinquantenzahl m_s** , bestimmt grundlegend die magnetischen Eigenschaften von Verbindungen und kann die Werte $-\frac{1}{2}$ und $+\frac{1}{2}$ annehmen. Damit kann ein Orbital mit höchstens zwei Elektronen besetzt werden, die sich jedoch spätestens in der Spinquantenzahl voneinander unterscheiden müssen, denn das bereits erwähnte Pauli-Verbot fordert allgemein, dass Elektronen in einem Atom in mindestens einer Quantenzahl verschieden sein müssen. Demzufolge kann einem Orbital, das bereits ein Elektron mit α -Spin ($\uparrow$) enthält, nur noch ein weiteres Elektron mit einem β -Spin ($\downarrow$) hinzugefügt werden. So kann ein s-Orbital maximal 2 Elektronen beinhalten, die drei p-Orbitale insgesamt 6, die fünf d-Orbitale zusammen 10 und die sieben f-Orbitale 14. Die Notation zur Beschreibung von **Elektronenkonfigurationen** in einem Atom variiert teilweise, die üblichste ist jedoch die mit der Bezeichnung des Orbitals und einer dahinterstehenden Angabe der Zahl der beherbergten Elektronen im Exponent. Für das Sauerstoffatom sieht das dann wie folgt aus: $1s^2 2s^2 2p^4$. Zu beachten hierbei ist allerdings, dass es gerade bei Elementen mit höheren Ordnungszahlen energetisch günstig ist, wenn Orbitale unbesetzt, halb oder vollständig gefüllt sind. Das bedeutet für Kupfer zum Beispiel, dass statt eines voll besetzten 4s Orbitals dieses nur mit einem Elektron belegt wird und das zweite als zehntes Elektron die d-Orbitale vervollständigt. Statt einer Konfiguration von $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$ ergibt sich für Kupfer $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$. Der Übersichtlichkeit halber reicht es bei Elektronenkonfigurationen sich nur auf die Valenzorbitale zu beschränken, die bei chemischen Reaktionen eine Rolle spielen. Generell ist die Abfolge der Orbitale hinsichtlich ihrer steigenden Energie wie folgt:



Die Gesamtzahl an Spins in einem Atom oder Molekül nennt man **Gesamtspin S** , aus dem die **Multiplizität** eines Atoms oder Moleküls errechnet werden kann. Die Gleichung hierfür lautet:

$$\text{Multiplizität} = 2S + 1 \quad (\text{Gl. 4})$$

Für das bereits bekannte O_2 -Molekül bedeutet dies bei einem Gesamtspin von $S = 2 \cdot (+\frac{1}{2}) = 1$ eine Multiplizität von 3, was einem sogenannten **Triplet**-Sauerstoffmolekül 3O_2 entspricht. Hat eines der beiden Elektronen im π^* -Orbital einen β -Spin, so ergibt sich mit einem Gesamtspin von 0 eine Multiplizität von 1 und damit ein **Singulet**-Sauerstoffmolekül 1O_2 , das deutlich reaktiver ist. Singulet-Sauerstoff kann unter Ausstrahlung (Emission) von Licht in Triplet-Sauerstoff über-

gehen, wie es experimentell in der Reaktion von Chlor Cl_2 mit Wasserstoffperoxid H_2O_2 unter basischen Bedingungen zu beobachten ist.

Elektronegativität

Mit dem Hintergrundwissen, dass in chemischen Reaktionen hauptsächlich Elektronen hin- und hergeschoben werden und chemischen Verbindungen die Tatsache zugrunde liegt, dass Elemente ihre Valenzelektronen mit anderen teilen, anderen wegnehmen oder hergeben, um zum Oktett zu gelangen, kann zurecht vermutet, dass verschiedene chemische Elemente ein unterschiedlich starkes Bedürfnis nach Elektronen haben, um zu ihrem Ziel, der Edelgaskonfiguration zu gelangen. Dies wird in der Chemie mit dem Begriff der **Elektronegativität χ** ausgedrückt. Allerdings gibt es mehrere Herangehensweisen zu ihrer Definition.

- Die Elektronegativität nach **ALLRED** und **ROCHOW** (χ_{AR}) berücksichtigt die elektrostatische Anziehungskraft F zwischen einer effektiven, von kernnahen Elektronen nicht abgeschirmten Kernladung z_{eff} und den Bindungselektronen und ist zu F direkt proportional.

$$F = \frac{z_{\text{eff}} \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2} \quad (\text{Gl. 5})$$

- Die Elektronegativität nach **MULLIKEN** (χ_{M}) beinhaltet als Grundlage die **Ionisierungsenergie (IE)** und **Elektronenaffinität (EA)** eines Elements. Erstere ist die Kenngröße für die Bereitschaft ein Elektron abzugeben, letztere steht für die Begierde ein Elektron aufzunehmen. Kurz gesagt:



Das arithmetische Mittel schließlich ergibt den Wert der Elektronegativität mit:

$$\chi_{\text{M}} = \frac{\text{IE} + \text{EA}}{2} \quad (\text{Gl. 8})$$

- Die bekanntere und ursprüngliche Elektronegativitätsskala nach **PAULING** (χ_{P}) reiht die Elemente willkürlich, wobei dem Element Fluor mit 4,0 der höchste Wert zugesprochen wird. Die Einordnung eines Elements X basiert aber vor allem darauf, wie polar seine Bindung zu einem anderen Bindungspartner Y beispielsweise ist. Hierfür wird der Mittelwert der Energien, die zur Spaltung der Bindungen X—X und Y—Y benötigt werden, betrachtet und schließlich vom tatsächlichen Wert der Energie, die für die Trennung der Bindung X—Y erforderlich ist, subtrahiert. Die Energie, die aufgewendet werden muss, um eine chemische Bindung zu spalten, heißt **Bindungsdissoziationsenergie E_{B}** .

Die Elektronegativität ist keine physikalisch exakt definierte und messbare Größe. Vielmehr geben die Differenzen ihrer Beträge eine relative Auskunft über die Beschaffenheit einer chemischen Bindung. Trotz verschiedener theoretischer

Annahmen geben alle drei Skalen χ_{AR} , χ_M und χ_P ähnliche Werte für ein einzelnes Element vor, wie in *Abbildung 10* zu sehen. Dennoch sind geringe Unterschiede in der Elektronegativität mit Vorsicht zu genießen, denn diese haben kaum Aussagekraft.

1	2	13	14	15	16	17	18
H 2,20 2,10 2,2							He
Li 0,97 1,28 0,98	Be 1,47 1,99 1,57	B 2,01 1,83 2,04	C 2,50 2,67 2,55	N 3,07 3,08 3,04	O 3,50 3,21 3,44	F 4,17 4,42 3,98	Ne
Na 1,01 1,21 0,93	Mg 1,23 1,63 1,31	Al 1,47 1,37 1,61	Si 1,74 2,03 1,9	P 2,06 2,39 2,19	S 2,44 2,65 2,58	Cl 2,83 3,54 3,16	Ar
K 0,91 1,03 0,82	Ca 1,04 1,30 1	Ga 1,82 1,34 1,81	Ge 2,02 1,95 2,01	As 2,20 2,26 2,18	Se 2,48 2,51 2,55	Br 2,74 3,24 2,96	Xe
Rb 0,89 0,99 0,82	Sr 0,99 1,21 0,95	In 1,49 1,78 1,78	Sn 1,72 1,83 1,96	Sb 1,82 2,05 2,05	Te 2,01 2,34 2,1	I 2,21 2,88 2,66	Kr
Cs 0,86 0,79 0,79	Ba 0,97 0,89 0,89	Tl 1,44 1,8 1,8	Pb 1,55 1,8 1,8	Bi 1,67 1,9 1,9	Po 1,76 2 2	At 1,96 2,2 2,2	Rn
Fr	Ra	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

■ Allred-Rochow ■ Mulliken ■ Pauling

Abbildung 10: Elektronegativitäten einiger Elemente nach Allred-Rochow (rot), Mulliken (blau) und Pauling (schwarz).

Allgemein ist feststellbar, dass Fluor das elektronegativste von allen Elementen ist und in Verbindungen am stärksten an den Bindungselektronen zieht. Dagegen heißen Metalle elektropositiv, sie geben Elektronen gerne ab. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, dass sich die Zahlenangaben ausschließlich auf die Elemente beziehen, denn die Elektronegativität des Fluorid-Anions F^- ist im Vergleich mit dem Fluoratom deutlich niedriger. Hiergegen können höher geladene Metall-Kationen relativ zum elementaren Zustand elektronegativer werden. In Abhängigkeit von der Verschiebung der elektronischen Ladungsdichte hin zu einem der Bindungspartner spricht man von einer **polaren Bindung**. Die Elektronegativität ist folglich ein Werkzeug, um die Polarität von chemischen Bindungen zu diskutieren, die im Einzelnen in einem der folgenden Kapitel näher beleuchtet werden.

Summenformeln

Chemische Verbindungen sind aus ihren Elementen und damit aus einer wohl bekannten Zahl an Atomen aufgebaut. Sogenannte Summenformeln helfen dabei an der Verbindung beteiligten Atomsorten und ihre Anzahl zu kennzeichnen. Daraus kann die resultierende Gesamtmasse, aber auch das Masseverhältnis der einzelnen Elemente in der Verbindung berechnet werden. So bilden ein Kohlenstoff- und ein Sauerstoffatom das Produkt Kohlenstoffmonoxid CO (abgekürzt auch: Kohlenmonoxid), während ein Kohlenstoffatom mit zwei Sauerstoffatomen zu Kohlenstoffdioxid CO₂ reagiert. Summenformeln geben keine Informationen über Struktur und räumliches Aussehen, sie reflektieren lediglich die Zusammensetzung des kleinsten Bausteins einer Verbindung, des Moleküls. Deshalb ist im Gegensatz zu CO₂, das ein Gas ist, Siliciumdioxid SiO₂ ein polymerer Feststoff, nämlich Quarz. Besonders bei komplizierteren Molekülen der organischen Chemie wird aus Summenformeln nicht schlüssig, welche Atome nun mit welchen tatsächlich verbunden sind. Die Formel C₂H₆O kann folglich sowohl für den Speisealkohol Ethanol als auch für das wasserähnliche Dimethylether stehen. Der Unterschied zwischen den beiden wird klar, wenn man zu Summenformeln detailliertere Strukturformeln hinzuzieht. Für die beiden letztgenannten Beispiele sind diese in [Abbildung 11](#) gezeigt.

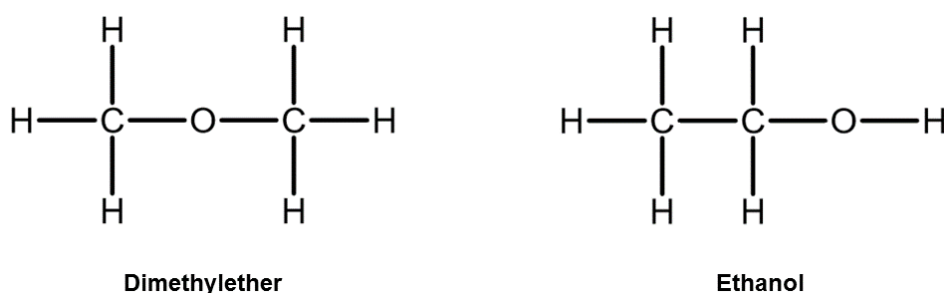


Abbildung 11: Strukturformeln von Dimethylether und Ethanol. Beide Verbindungen haben die Summenformel C₂H₆O.

Lewis-Formeln (Strukturformeln)

Strukturformeln, auch Lewis-Formeln genannt, zeigen in der Regel Elektronenpaarbindungen und versuchen eine erste Aussage über die Gestalt des Moleküls zu treffen. Zur Darstellung werden einzelne Elektronen als „Punkt“ gekennzeichnet. Elektronenpaare werden entweder nach der mittlerweile eher veralteten Lewis-Methode mit zwei Punkten nebeneinander oder aber mit einem „Strich“ ausgedrückt. Für die Atome der Elemente Wasserstoff, Stickstoff, Sauerstoff und Chlor sieht dies wie in [Abbildung 12](#) aus.

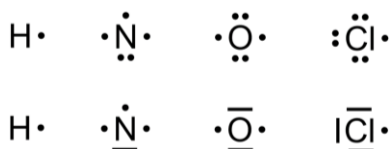


Abbildung 12: Strukturformeln des Wasserstoff-, Stickstoff-, Sauerstoff- und Chloratoms.

Atome oder Moleküle mit einem ungepaarten Elektron heißen **Radikale**. Diese sind äußerst reaktiv und können in Form heftiger Reaktionen durch Spinkopplung dieser ungepaarten Elektronen zu Elektronenpaaren und damit zu einer chemischen Bindung verknüpfen. Neben Einfachbindungen, die aus der Kombination von zwei Wasserstoffatomen oder einem Wasserstoff- und einem Chloratom entstehen, formuliert man für das Singulett-Sauerstoffmolekül $^1\text{O}_2$ eine Doppelbindung, für das Stickstoffmolekül eine Dreifachbindung, siehe [Abbildung 13](#).

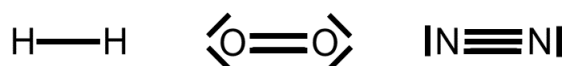


Abbildung 13: Strukturformel von H_2 , $^1\text{O}_2$ und N_2 .

Zum Zeichnen solcher Lewis-Formeln gibt es eine allgemeine Vorgehensweise. Hierzu addiert man zuerst die Zahl der **Valenzelektronen (VE)** aller an der Verbindung beteiligten Elemente. Teilchen (Atome, Ionen, Moleküle) mit der gleichen Anzahl an Valenzelektronen heißen **isovalenzelektronisch** (Bsp.: CO , NO^+ , N_2). Handelt es sich um ein Anion, kommt die Zahl der Ladung hinzu. Im Falle eines Kations muss die positive Ladung subtrahiert werden. Als zweiter Schritt wird die verbleibende Zahl an Elektronen durch zwei dividiert, um die Zahl an **Elektronenpaaren (EP)** zu erhalten. Schließlich beginnt man die Elektronenpaare zu verteilen, indem zwischen den entsprechenden Atomen zunächst Bindungen eingezeichnet und die restlichen als **freie Elektronenpaare** den elektronegativen Elementen zugeordnet werden. Es ist streng drauf zu achten, dass das Elektronenoktett nicht überschritten wird, quasi ein Atom mit Ausnahme von Wasserstoff nicht mehr als vier „Striche“ entweder als Bindung oder als freies Elektronenpaar in seiner unmittelbaren Umgebung besitzt. Als erstes Beispiel für das Aufstellen einer Strukturformel soll Ammoniak NH_3 dienen. [Abbildung 14](#) zeigt die Vorgehensweise bis zur fertigen Lewis-Formel.

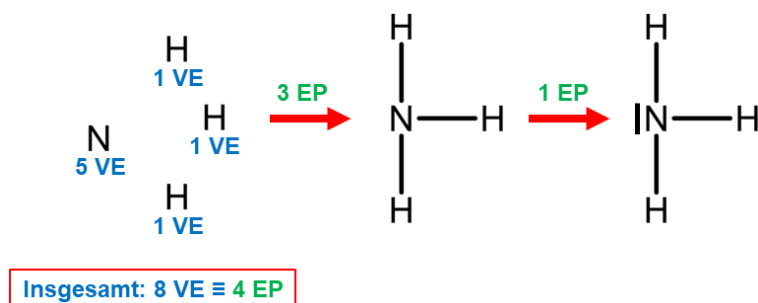


Abbildung 14: Aufstellen der Lewis-Formel von Ammoniak NH_3 .

Stickstoff steht in der 5. Hauptgruppe und besitzt somit 5 Valenzelektronen. Wasserstoff aus der ersten Hauptgruppe bringt nur ein Valenzelektron mit. Mit $5 + 3 = 8$ stehen 8 Elektronen insgesamt zur Verfügung, die gemäß $8 : 2 = 4$ zu vier Elektronenpaaren gekoppelt werden können. Nun werden zwischen Stickstoff und den drei H-Atomen Einfachbindungen gezeichnet. Das letzte Elektronenpaar dient als freies Elektronenpaar am Stickstoffatom und die Lewis-Formel für NH_3 ist fertig. Als zweites Beispiel soll das Carbonat-Anion CO_3^{2-} betrachtet werden. Auch hierfür spiegelt [Abbildung 15](#) eine Anleitung wieder.

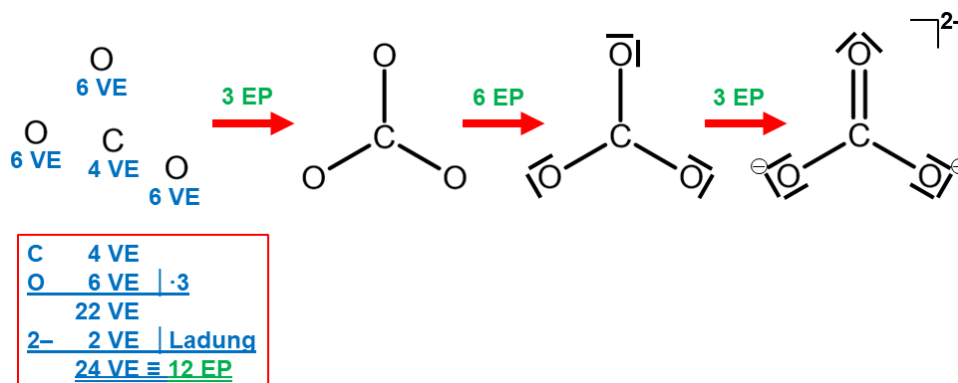


Abbildung 15: Aufstellen der Lewis-Formel des Carbonat-Anions CO_3^{2-} .

Die ersten neun Elektronenpaare dienen als Einfachbindungen und freie EP, erst bei der Verteilung der übrigen drei wird klar, dass zwischen dem Kohlenstoff- und einem der drei Sauerstoffatome eine Doppelbindung gebildet werden muss. So erfüllt sich die Oktett-Regel. Werden die freien Elektronenpaare in einzelne Elektronen zerlegt ([Abbildung 16](#)), so kann man feststellen, dass einzelne Elemente mehr Elektronen in ihrer unmittelbaren Nähe haben, als sie laut ihrer Gruppennummer im PSE haben sollten. Am Beispiel des Carbonat-Anions betrifft es zwei Sauerstoffatome, die in der folgenden Abbildung grün und rot markiert sind.

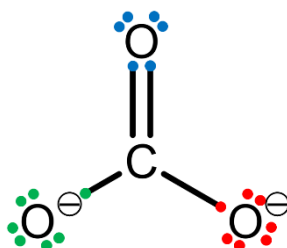


Abbildung 16: Strukturformel von Carbonat mit einzelnen Elektronen zum Bestimmen von Formalladungen.

Während das doppelt gebundene Sauerstoffatom sechs Elektronen in nächster Umgebung hat, was auch der tatsächlichen Zahl an Valenzelektronen eines Sauerstoffatoms entspricht, beherbergen die anderen beiden sieben um sich herum und damit eines mehr als sie im elementaren Zustand besitzen. Daraus resultiert eine sogenannte negative **Formalladung**, die mit einem eingekreisten Ladungssymbol $\oplus$ oder $\ominus$ gekennzeichnet werden. Besonders deutlich wirkt sich die Oktett-Regel auf das Phosphat-Anion aus, bei dem das Phosphoratom eine positive Formalladung enthält,

um einer in der **VB-Theorie** (engl.: *valence bond*; deutsch: Valenzbindung) vereinzelt als „Hypervalenz“ geführten Fünfbindigkeit und damit einhergehenden Überschreitung des Elektronenoktetts des Phosphoratoms zu entgehen, die in der Fachliteratur bedauerlicherweise dennoch verbreitet ist. *Abbildung 17* zeigt die Strukturformel unter Einhaltung der Oktett-Regel.

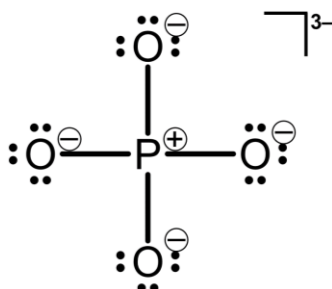


Abbildung 17: Strukturformel des Phosphat-Anions unter Wahrung der Oktett-Regel.

Die positive Formalladung des Phosphoratoms hebt sich mit der negativen eines der Sauerstoffatome auf, sodass insgesamt drei negative Ladungen übrigbleiben, für PO_4^{3-} eben. Hypervalenz wird aber auch bei der VB-Methode weitestgehend vermieden, indem in besonderen Fällen die Delokalisierung von Elektronenpaaren, ungepaarten Elektronen oder Formalladungen durch **mesomere Grenzformeln** ausgedrückt werden.

Stöchiometrie – Stoffmenge

Bereits im 18. Jahrhundert etwa war bekannt, dass Stoffe aus kleinsten Teilchen in einem bestimmten Verhältnis aufgebaut sind. Zur Herstellung dieser müssen umgekehrt diese kleinsten Teilchen, die als Elemente identifiziert worden waren, in einem wohl definierten Verhältnis miteinander reagieren. Dabei gelten drei grundlegende Regeln, die **stöchiometrischen Gesetze**.

- Das **Gesetz von der Erhaltung der Masse** besagt, dass bei einer chemischen Reaktion hauptsächlich eine Umverteilung von Atomen stattfindet und die Gesamtmasse damit konstant bleiben muss. Folglich ist die Masse aller Produkte gleich zu setzen mit der Masse aller Edukte. Diese Gesetzmäßigkeit hat ihre Gültigkeit ausschließlich im Makroskopischen und berücksichtigt keine relativistischen Effekte, bei denen Masse in Energie umgewandelt werden kann, denn diese Änderungen der Masse sind derart gering, meist im vierten Nachkommastellenbereich, dass sie für die Chemie vernachlässigt werden kann.
- Das **Gesetz der konstanten Proportionen** gibt vor, dass für eine bestimmte chemische Verbindung die benötigten Edukte in einem wohl definierten und konstanten Mengenverhältnis miteinander reagieren müssen. So muss 1,000 g Kohlenstoff stets mit 1,333 g Sauerstoff umgesetzt werden, um zu Kohlenmonoxid CO zu gelangen.



Ebenso wird Kohlendioxid CO_2 immer aus 1,333 g Kohlenstoff und 2,667 g Sauerstoff gebildet.



- Das **Gesetz der multiplen Proportionen** verweist auf die Tatsache, dass im Falle mehrerer Möglichkeiten für Zusammensetzungen zweier Elemente, wie bei Kohlenstoff und Sauerstoff, die Massen des in unterschiedlichen Mengen eingesetzten Elements ganzzahlige Vielfache voneinander sind. Im Falle von Kohlenstoffmonoxid und Kohlenstoffdioxid verhalten sich die Massen an verbrauchtem Sauerstoff wie 1,333 g : 2,667 g = 1 : 2.

Für die Masse von Atomen, die im Periodensystem neben den Elementsymbolen als reine Zahlangaben stehen (siehe [Abbildung 5](#)), sind oft verschiedene Einheiten. So steht u für „unit“, au für „atomic unit“ und D für „Dalton“. Für die Umrechnung in Gramm gilt:

$$1 \text{ u} = 1,660540 \cdot 10^{-24} \text{ g} \quad (\text{Gl. 11})$$

Gleichzeitig ist 1 u als $\frac{1}{12}$ der Atommasse eines ^{12}C -Kohlenstoffnuklids definiert. Aus Atommassen können **relative Molekülmassen** M_r für einzelne Moleküle errechnet werden. Für Wasser H_2O sieht dies folgt aus:

$$M_r(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,0079(\text{H}) + 15,999(\text{O}) = 18,0148 \quad (\text{Gl. 12})$$

Ist eine Verbindung aus der Wiederholung einer festen Formeleinheit aufgebaut, wie beispielsweise Quarz SiO_2 , so wird analog zur relativen Molekülmasse die „**Formelmasse**“ ermittelt.

$$M_r(\text{SiO}_2) = 28,085(\text{Si}) + 2 \cdot 15,999(\text{O}) = 60,083 \quad (\text{Gl. 13})$$

Begriff des Mol

Für quantitative Umsetzungen bei chemischen Reaktionen ist es nach den stöchiometrischen Gesetzen von besonderer Bedeutung zu wissen, wie viele Teilchen (Atome, Moleküle oder Formeleinheiten) mit einander zu den gewünschten Produkten reagieren müssen. Anders ausgedrückt: Wie viele H_2 -Moleküle müssen mit wie vielen Cl_2 -Molekülen zur Reaktion kommen, um am Ende Chlorwasserstoff HCl zu erhalten. Eine vorgegebene Menge an Wasserstoff legt damit automatisch die Menge an Chlor fest, die stöchiometrisch für die Bildung von HCl erforderlich ist. Allgemein sind bei chemischen Reaktionen folglich die Mengen der beteiligten Verbindungen oder Elemente voneinander abhängig. Die **Stoffmenge** n trägt in der Chemie die Einheit „mol“. Per Definition entspricht 1 mol eines beliebigen Stoffes der gleichen Anzahl an Teilchen (Atome, Moleküle, Formeleinheiten), wie Atome in 12 g des ^{12}C -Kohlenstoffisotopes enthalten sind. Aus der **Avogadro-Konstante** N_A , die die Stoffmenge n mit der Teilchenzahl N gemäß

$$n = \frac{N}{N_A} \quad (\text{Gl. 14})$$

in Zusammenhang bringt, bestimmte J. LOSCHMIDT den Zahlenwert $6,022 \cdot 10^{23}$ als eine konstante Zahl an Teilchen in 1 mol eines beliebigen Stoffes. Folglich gilt:

$$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \frac{\text{Teilchen}}{\text{mol}} \quad (\text{Gl. 15})$$

Der Zahlenwert der Masse pro mol eines Elements, also die **molare Masse M** , entspricht der Atommasse und damit der im PSE angegebenen Massenzahl. Demzufolge stimmt auch die molare Masse von Molekülen und Formeleinheiten zahlenmäßig mit der relativen Molekülmasse M_r überein. Der einzige, aber wesentliche Unterschied: M trägt die Einheit $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$ oder auch $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$. Stoffmenge, molare Masse und die tatsächliche, abgewogene Masse m eines Stoffes X sind über die Gleichung

$$n(X) = \frac{m(X)}{M(X)} \quad (\text{Gl. 16})$$

miteinander verknüpft. Nun kann eine chemische Reaktion mit Kenntnis der entsprechenden Summenformeln auch quantitativ erfasst werden. Am Beispiel der Chlorknallgasreaktion sieht die zugehörige Reaktionsgleichung wie folgt aus:



Gesprochen lautet sie: „1 mol Wasserstoff (H_2) reagiert mit 1 mol Chlor (Cl_2) zu 2 mol Chlorwasserstoff (HCl)“. Die Koeffizienten vor den Summenformeln kennzeichnen generell die Stoffmenge der Reaktanden. Um auf die richtige Stoffmenge zu kommen, müssen Reaktionsgleichungen grundsätzlich stöchiometrisch ausgeglichen sein, deshalb auch die Bezeichnung „-gleichung“. Dazu muss beachtet werden, dass sowohl auf der Seite der Edukte (linke Seite) als auch auf der Seite der Produkte (rechte Seite) von allen Atomsorten die gleiche Anzahl vorliegt. In Gl. 17 finden sich beiderseits jeweils zwei Chlor- und zwei Wasserstoffatome.

Gase – Das ideale Gas

Als Gase werden Stoffe, Atome oder Moleküle, im **gasförmigen Aggregatzustand** bezeichnet. Das heißt, sie sind in der Lage einen definierten geschlossenen Raum vollständig und gleichmäßig auszufüllen. Die beiden anderen Aggregatzustände heißen **flüssig** und **fest**. Teilchen im Gasraum können zwar aneinanderstoßen, sind aber auch so weit voneinander entfernt, dass eine Durchmischung mit Teilchen eines zweiten Gases oder mehrerer anderer Gase grundsätzlich gewährleistet ist. Folglich sind Gasgemische im Gegensatz zu Flüssigkeiten und Feststoffen immer homogen. Wie oft Atome oder Moleküle im Gasraum miteinander kollidieren, hängt von zwei Parametern ab, dem **Druck p** und der **Temperatur T** . Mit ihrer Hilfe können auch **Gasreaktionen** gesteuert werden. Während der Druck den Platzbedarf der Gasteilchen mit dem zur Verfügung stehenden Gasraum in Zusammenhang bringt, äußert sich die Temperatur in ihrer Bewegungsenergie. Je höher die Temperatur, umso schneller die Teilchen. Verkleinert man den Gasraum, beispielsweise das **Volumen V** eines Gasbehälters, so werden die Gasteilchen komprimiert, der Druck steigt. Ein hypothetisches Gas, dessen Teilchen kein Eigenvolumen besitzen, sodass das Volumen des Gasraums auf null verkleinert werden kann, ohne dass die Gasteilchen dabei miteinander in Wechselwirkung geraten oder es zu einer Änderung des Aggregatzustandes

von gasförmig auf flüssig kommt, wird als **ideales Gas** bezeichnet. Bereits J. L. GAY-LUSSAC erklärte, dass bei steigender Temperatur eines idealen Gases der Druck direkt proportional zunimmt. Folglich gilt:

$$p \propto T \quad \text{oder} \quad \frac{p}{T} = \text{const.} \quad (\text{Gl. 18})$$

Ferner beobachteten R. BOYLE und E. MARIOTTE, dass mit der Komprimierung des Volumens eines geschlossenen Gasraums eine umgekehrt proportionale Erhöhung des Drucks des darin befindlichen Gases einhergeht. Also:

$$p \propto \frac{1}{V} \quad \text{oder} \quad p \cdot V = \text{const.} \quad (\text{Gl. 19})$$

Unter Berücksichtigung der Ausdehnung des Gasraumes bei zunehmender Temperatur in direkt proportionalem Verhältnis

$$V \propto T \quad \text{oder} \quad \frac{V}{T} = \text{const.} \quad (\text{Gl. 20})$$

ergibt sich in Abhängigkeit von der Zahl der Gasmoleküle oder -atome N folgende Beziehung:

$$\frac{p \cdot V}{T} = N \cdot k_B \quad (\text{Gl. 21})$$

Die Konstante k_B heißt **Boltzmann-Konstante** und beschreibt den Zusammenhang der Druck-Volumen-Arbeit $p \cdot V$ und der dabei freiwerdenden Wärmeenergie $k_B \cdot T$. Über die Gleichungen

$$k_B = \frac{R}{N_A} \quad \text{und} \quad n = \frac{N}{N_A} \quad (\text{Gl. 22})$$

lässt sich Gl. 21 in die als ideales Gasgesetz bekannte Form umformen, so dass schlussendlich gilt:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad (\text{Gl. 23})$$

Dabei steht R für die **allgemeine Gaskonstante** und n für die Stoffmenge des betrachteten Gases. Bei 0 °C, oder anders ausgedrückt bei 273,15 K, besitzt das ideale Gas ein Molvolumen von etwa 22,4 $\frac{\text{L}}{\text{mol}}$. Wasserstoff, Stickstoff und Sauerstoff können aufgrund ihres niedrigen Siedepunktes annähernd als ideale Gase interpretiert werden. Insbesondere bei letzterem kann auf diese Weise in einem einfachen Experiment das Vorkommen als zweiatomiges Molekül bewiesen werden. Mit

$$n = \frac{m}{M} \quad (\text{Gl. 24})$$

erhält man:

$$M = \frac{m \cdot R \cdot T}{p \cdot V} \quad (\text{Gl. 25})$$

Das Ergebnis liefert im Falle des Sauerstoffs bei einer definierten Temperatur und Einwaagemasse m sowie bekanntem Druck und Volumen eine molare Masse M von rund 32 $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$ statt der erwarteten 16 $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$. Demzufolge liegt Sauerstoff weder als O noch als O₃, sondern hauptsächlich als O₂ vor.

Die chemische Bindung

Treten zwischen gleichen oder verschiedenen chemischen Elementen einander anziehende Kräfte, sogenannte attraktive Wechselwirkungen, auf, können aus Elementen Verbindungen entstehen, die wir bereits in den Kapiteln zuvor kennen gelernt haben. Der so resultierende Zusammenhalt zwischen den einzelnen Atomen wird als **chemische Bindung** bezeichnet. Ihr Zustandekommen kann diverse Ursachen haben.

Kovalente Bindung

Wechselwirken nach der bereits bekannten LCAO-MO-Theorie Elektronen der Valenzorbitale von Elementen miteinander, so spricht man von kovalenten Bindungen. Hierbei wird zwischen polaren und unpolaren kovalenten Bindungen unterschieden. Letztere sind meist bei Elementmolekülen wie H_2 , N_2 , O_2 oder Cl_2 , aber auch P_4 - oder S_8 -Molekülen zu finden. In der energetischen Auftragung der Atom- und Molekülorbitale liegen die AO bei unpolaren Bindungen bei gleichen Energiewerten, siehe [Abbildung 18](#) zum Beispiel des H_2 -Moleküls.

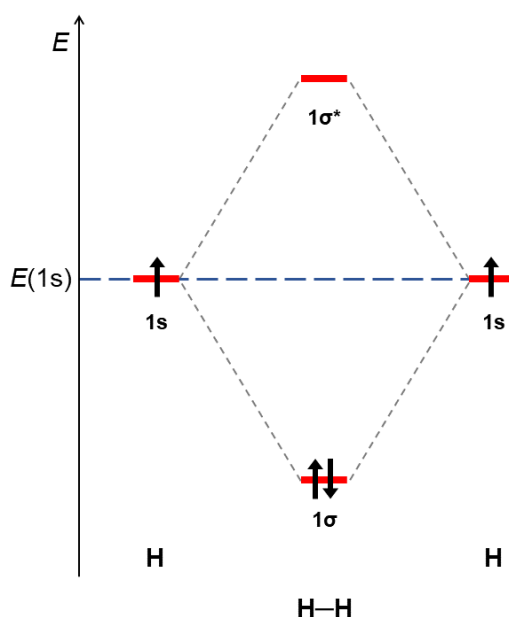


Abbildung 18: Qualitative Darstellung der energetischen Auftragung der AO und MO im Wasserstoffmolekül.

Anders dagegen erscheint das MO-Schema zum deutlich polarerer Fluorwasserstoff HF. Das $2p$ -Atomorbital des elektronegativeren Fluoratoms ist im Vergleich zum $1s$ -Orbital des Wasserstoffatoms energetisch abgesenkt. Analog zum HCl-Molekül wechselwirken diese beiden Orbitale miteinander, um eine kovalente Bindung aufzubauen. Hier allerdings ist im

1 σ -Molekülorbital ein erheblich größerer Anteil des 2p-Orbitals von Fluor zu erwarten als im Falle des Chlorwasserstoffs. Die graphische Auftragung der AO und MO im HF-Molekül ist [Abbildung 19](#) zu entnehmen.

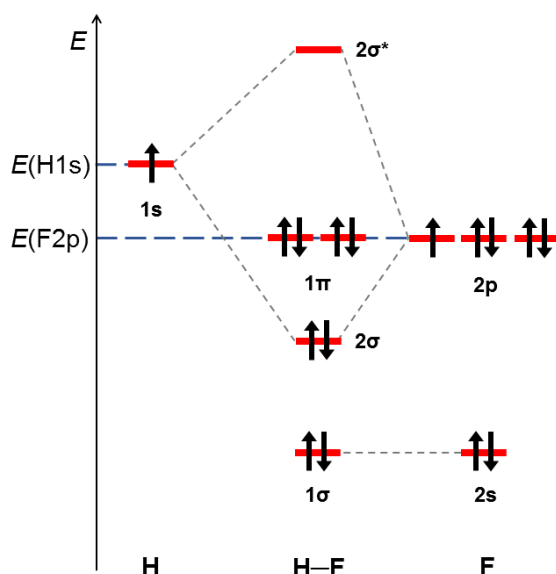


Abbildung 19: Qualitative Darstellung der energetischen Auftragung der AO und MO im Fluorwasserstoff-Molekül.

Die Polarität und das damit unmittelbar verknüpfte Dipolmoment eines Moleküls sind auf die beiden an der kovalenten Bindung beteiligten Elemente zurückzuführen. Nach der Pauling-Skala beträgt die Differenz der Elektronegativitäten von Wasserstoff und Fluor etwa 1,8. Das Fluoratom zieht mehr an den Bindungselektronen als das Wasserstoffatom, sodass die Ladungsdichte dieser kovalenten Bindung auf die Seite des Fluors hin verschoben ist. Kovalente Bindungen allgemein werden in der Lewis-Schreibweise von Strukturformeln, wie bereits in vorangegangenen Kapiteln besprochen, als „Striche“ dargestellt. Für das Fluorwasserstoff-Molekül sieht dies wie in [Abbildung 20](#) dargestellt aus.



Abbildung 20: Mögliche Schreibweisen von Lewis-Formeln von HF ohne freie Elektronenpaare am Fluoratom.

Die Kennzeichnung von Polarisierung in einer kovalenten Bindung erfolgt durch die Formulierung sogenannter **Partialladungen** $\delta+$ und $\delta-$. Durch diese elektrische Teilladung erinnern solche Moleküle auch an Spannungsquellen mit einem Plus- und einem Minuspol. Daher werden sie auch als **Dipole** oder als Dipolmoleküle bezeichnet. Ein Maß für die Polarität eines Moleküls ist sein **Dipolmoment** p , das sich aus dem Produkt der Ladung und des Abstandes der Ladungen errechnen lässt. Während im Fluorwasserstoff das Dipolmoment einfach von der negativen Ladung auf die positive gerichtet ist, muss bei mehreren Einzeldipolmomenten durch Vektoraddition ein Gesamtmoment ermittelt werden. Im Falle von Wasser H_2O sieht dies wie in [Abbildung 21](#) aus.

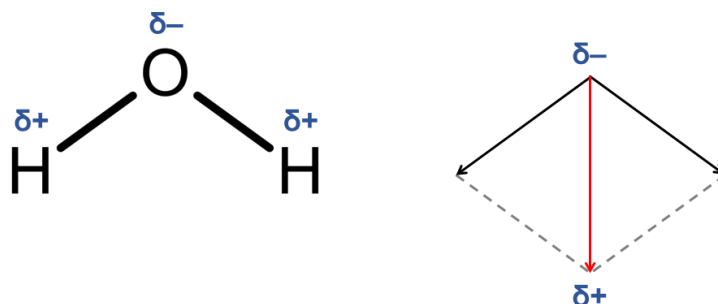


Abbildung 21: Dipolmoment im Wassermolekül. Einzelmomente (schwarz), Gesamtmoment (rot).

Wasserstoffbrückenbindungen

Im Jahre 1912 sank das Luxusschiff Titanic auf ihrer Jungfernfahrt von Southampton auf dem Weg nach New York City, nachdem es mit einem schwimmenden Eisberg kollidiert war. Festes Wasser, das im Allgemeinen Eis genannt wird, schwimmt auf flüssigem Wasser. Folglich muss die Dichte von Eis kleiner als die von Wasser sein. Wie ist dies aber möglich, ziehen sich doch Stoffe bei tieferen Temperaturen zusammen und erhöhen so ihre Dichte? Entsprechend können Wasserflaschen in Wintermonaten bei frostiger Kälte auf der Terrasse oder auf dem Balkon aufplatzen, während sich das Eis dabei seinen Weg durch die Öffnungen und Risse der Flaschen bahnt. Im Gegensatz zu anderen Feststoffen bilden sich in festem Wasser Bindungen aus, die es in den anderen Aggregatzuständen (Flüssigkeit, Dampf) entweder nicht gibt oder sich nicht gleich bemerkbar machen. Sie heißen **Wasserstoffbrückenbindungen**. Sie entstehen durch Wechselwirkungen der im Wassermolekül positiv teilgeladenen H-Atome mit freien Elektronenpaaren von Sauerstoffatomen anderer Wassermoleküle. Dasjenige H₂O-Molekül, dessen H-Atom mit dem Sauerstoffatom eines zweiten Wassermoleküls eine Wasserstoffbrückenbindung aufbaut, wird als **Wasserstoffbrückenbindungsdonor** oder **hb-Donor** bezeichnet (von engl.: *hydrogen bridge* für Wasserstoffbrücke). Umgekehrt gilt die H₂O-Einheit, deren O-Atom mit einem H-Atom eines fremden Wassermoleküls wechselwirkt als **Wasserstoffbrückenbindungsakzeptor** oder **hb-Akzeptor**, siehe [Abbildung 22](#).

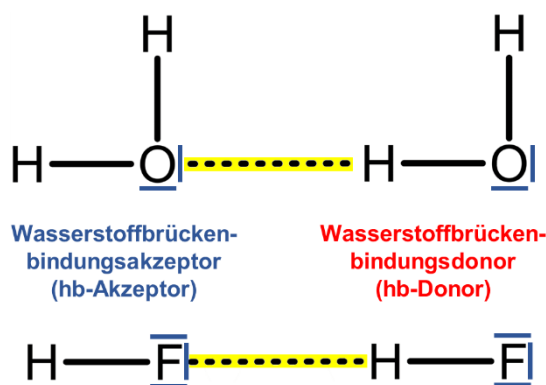


Abbildung 22: Beispiel einer Wasserstoffbrückenbindung im Wasser- und Fluorwasserstoffmolekül.

Für Wasserstoffbrückenbindungen eignen sich neben Wasser auch andere Verbindungen, in denen Wasserstoffatome über polarisierte kovalente Bindungen gebunden sind, wie im Fluorwasserstoff- (HF), Chlorwasserstoff- (HCl) oder Ammoniakmolekül (NH_3). Wasserstoffbrücken weisen gewöhnlich einen höheren Bindungsabstand auf als kovalente Bindungen. Wasser als Feststoff, das eine Vielzahl solcher Bindungen enthält, besitzt folglich eine kleinere Dichte als die flüssige Form. Einen Ausschnitt aus einem sogenannten **Cluster** von über Wasserstoffbrückenbindungen miteinander verknüpften H_2O -Molekülen zeigt schematisch *Abbildung 23*.

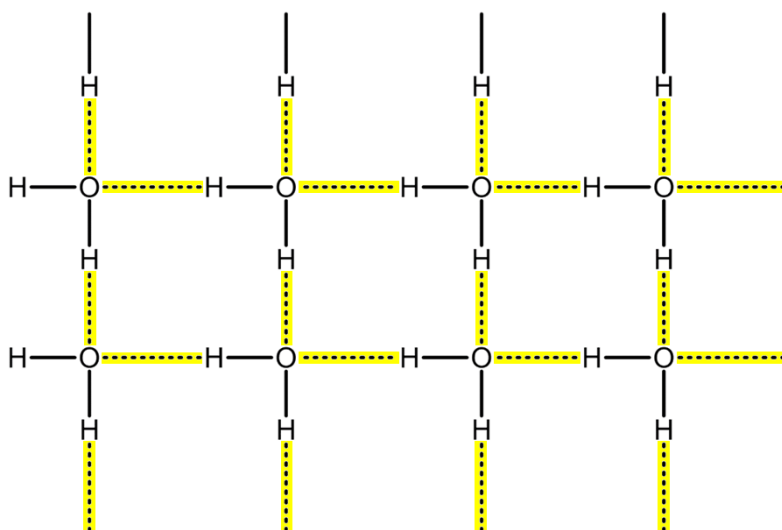


Abbildung 23: Schematischer Aufbau von Eis. Wassermoleküle sind über Wasserstoffbrückenbindungen miteinander verknüpft.

Entsprechend zu kovalenten Bindungen sind Wasserstoffbrücken räumlich ausgerichtete Bindungen. Bei geeigneter Abfolge von hb-Donoren und -Akzeptoren lässt sich ein **kooperatives Wasserstoffbrückenbindungssystem** aufbauen, das die Stabilität der Wasserstoffbrückenbindungen und damit auch die der Gesamtstruktur erhöht (*Abbildung 24*). Dies zeigt sich besonders an der Härte von Eis. Gerade die Modifikation $\text{Eis}_{1\text{h}}$ weist mit ihren Wasserstoffbrücken zudem die gleiche Struktur auf wie Diamant.

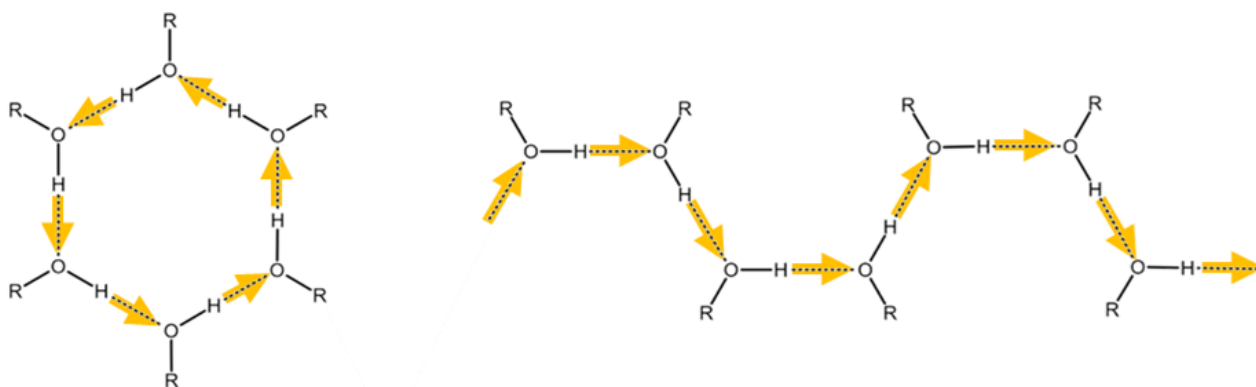


Abbildung 24: Verknüpfte Wasserstoffbrücken einer Richtung in einem kooperativen Wasserstoffbrückenbindungssystem.

In der analytischen Chemie wird die Fähigkeit zur Ausbildung von Wasserstoffbrückenbindungen (H-Brücken) in der **Konduktometrie** zur quantitativen Bestimmung von Säure- oder Basenmengen in wässriger Lösung genutzt. Die Konduktometrie beruht auf der unterschiedlichen elektrischen Leitfähigkeit von sauren, basischen Lösungen oder Lösungen von Salzen. Im Versuch hierfür werden zwei Elektroden, die jeweils an einen Pol (Plus- oder Minuspol) einer Spannungsquelle angeschlossen sind, in die Lösung getaucht und mittels eines in den Stromkreis geschalteten Messgerätes die Leitfähigkeit ermittelt. Ähnlich wie bei einer Titration (siehe Skript **Säuren und Basen**) wird eine unbekannte Menge von Säure in wässriger Lösung beispielsweise mit einer Base bekannter Konzentration tropfenweise versetzt, dabei die spezifische Leitfähigkeit der Titrierlösung gemessen und die Werte gegen das zugegebene Basenvolumen in einem Koordinationssystem aufgetragen. Dabei ergibt sich der in **Abbildung 25** dargestellte Funktionsgraph.

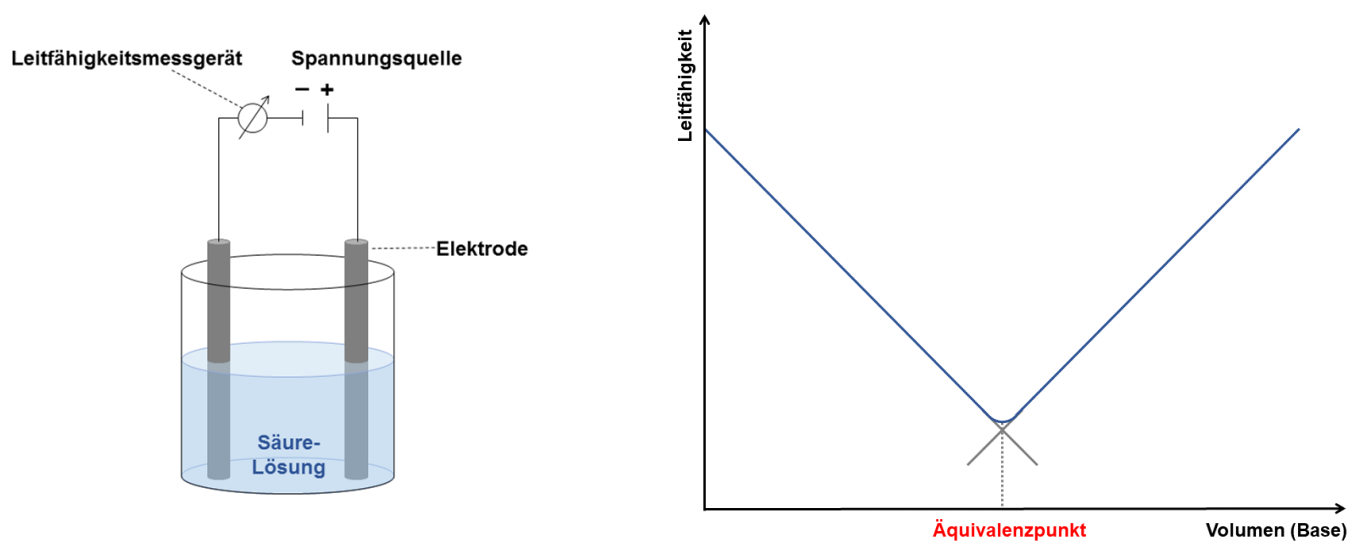


Abbildung 25: Versuchsaufbau zur Messung der Leitfähigkeit einer sauren Lösung (Bild links). Schematischer Verlauf der Änderung der konduktometrisch gemessenen Leitfähigkeit einer wässrigen Säurelösung unbekannter Konzentration bei stetiger Zugabe einer Base bekannter Konzentration (Bild rechts).

Es ist auffallend, dass in rein sauren oder basischen Lösungen, folglich bei einem Überschuss an Oxonium- H_3O^+ und Hydroxid-Ionen OH^- , die Leitfähigkeit deutlich höher ist als am sogenannten Äquivalenzpunkt, an dem die wässrige Lösung eine reine Salzlösung ist und nur Kationen wie Na^+ oder K^+ sowie Anionen wie Cl^- oder Br^- enthält. Eine Erklärung für diese Beobachtung liefert der **Grotthuß-Mechanismus**, der in **Abbildung 26** zu sehen ist. In saurer Lösung als Beispiel liegen Oxonium-Ionen H_3O^+ im Überschuss vor. Die Wassermoleküle selbst bilden eine Kette aus Wasserstoffbrückenbindungen, an deren Ende sich ein H_3O^+ -Ion anlagern kann. Durch einfaches Umklappen eines der freien Elektronenpaare der Sauerstoffatome an den Wassermolekülen kann die positive Ladung des Oxonium-Ions durch die Ketten und damit im elektrischen Feld von einer Elektrode zur anderen transportiert werden, ohne dass sich die Ionen selbst durch die Lösung bewegen müssen, wie es bei den Kationen (Na^+ , K^+) und Anionen (Cl^- , Br^-) der Fall ist.

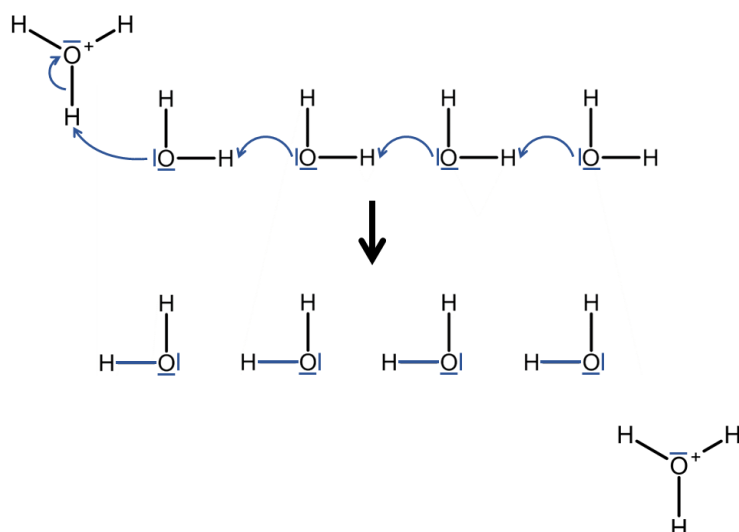


Abbildung 26: Grotthuß-Mechanismus als Erklärung für die hohe elektrische Leitfähigkeit von sauren oder basischen Lösungen.

Damit lässt sich auch der Graph in [Abbildung 25](#) nachvollziehen. Zu Beginn liegt eine Säure unbekannter Konzentration vor. Die Oxonium-Ionen verursachen eine hohe Leitfähigkeit. Durch stetige Zugabe von Base werden die Oxonium-Ionen durch Hydroxid-Ionen zu Wasser neutralisiert, die Leitfähigkeit der Lösung sinkt. Sind alle H_3O^+ durch OH^- verbraucht, so müssen sich die entsprechenden, übrig gebliebenen Kationen und Anionen als Bestandteile der Base und Säure durch die Lösung bewegen, um die elektrischen Ladungen zwischen Plus und Minuspol zu transportieren, die Leitfähigkeit ist an ihrem tiefsten Punkt, dem Äquivalenzpunkt, angekommen. Bei weiterer Zufuhr von Base gelangen immer mehr Hydroxid-Ionen in die Lösung und die Leitfähigkeit beginnt zu steigen. Der Überschuss an OH^- erlaubt analog zur Säure die Übertragung von elektrischer Ladung zwischen den Elektroden durch Umklappen von Bindungen.

Koordinative Bindung

Neutramoleküle, aber vor allem Anionen verfügen über freie Elektronenpaare. Diese können sie beispielsweise einsetzen, um H^+ -Ionen, sogenannte Protonen, zu binden. In diesem Fall fungieren sie als Brønsted-Basen. Das Prinzip hierzu wird im Skript [Säuren und Basen](#) ausführlich erläutert. Aber auch Metall-Kationen, unter ihnen besonders die Übergangsmetall-Kationen wie Fe^{3+} , Cu^{2+} oder Ag^+ , können mit solchen freien Elektronenpaaren wechselwirken. Dann entstehen Verbindungen, die in der Chemie allgemein als Metall-Komplexe oder Übergangsmetall-Komplexe bezeichnet werden. Die Bindungen zwischen den Anionen oder Neutramolekülen und den Metall-Ionen heißen **koordinative Bindungen** oder **dative Bindungen**. Mit Hilfe solcher Komplexe lässt sich die Farbe von Salzen der Übergangsmetalle ebenso wie die saure Eigenschaft ihrer wässrigen Lösungen erklären. Für das Themengebiet der Chemie von Metall-Komplexen ist das Skript [Koordinationschemie – Einführung](#) gewidmet, in dem auch der Bindungstyp selbst ausgiebig diskutiert wird.

Ionenbindung

Im Gegensatz zu kovalenten Bindungen werden bei Ionenbindungen die für die Bindung vorgesehenen Elektronen vollständig auf den elektronegativeren Bindungspartner übertragen. Die räumliche Ausrichtung der Bindung erlischt dabei. Die Struktur einer solchen ionischen Verbindung lässt sich als ein Wechsel aus positiv und negativ geladenen Teilchen verstehen, entlang einer Raumachse also als eine Abfolge aus Kationen und Anionen. Die Bindungsenergie, der Zusammenhalt der Bindung, beruht im Wesentlichen auf der elektrostatischen Anziehung ungleichnamiger Ladungen. In der Schreibweise von Summenformeln wird der ionische Charakter einer Verbindung durch die Formulierung von Ladungen hervorgehoben. Im Falle des Kochsalzes Natriumchlorid lautet die Summenformel Na^+Cl^- . Die zugehörige Struktur erinnert zunächst an einen Würfel, siehe [Abbildung 27](#).

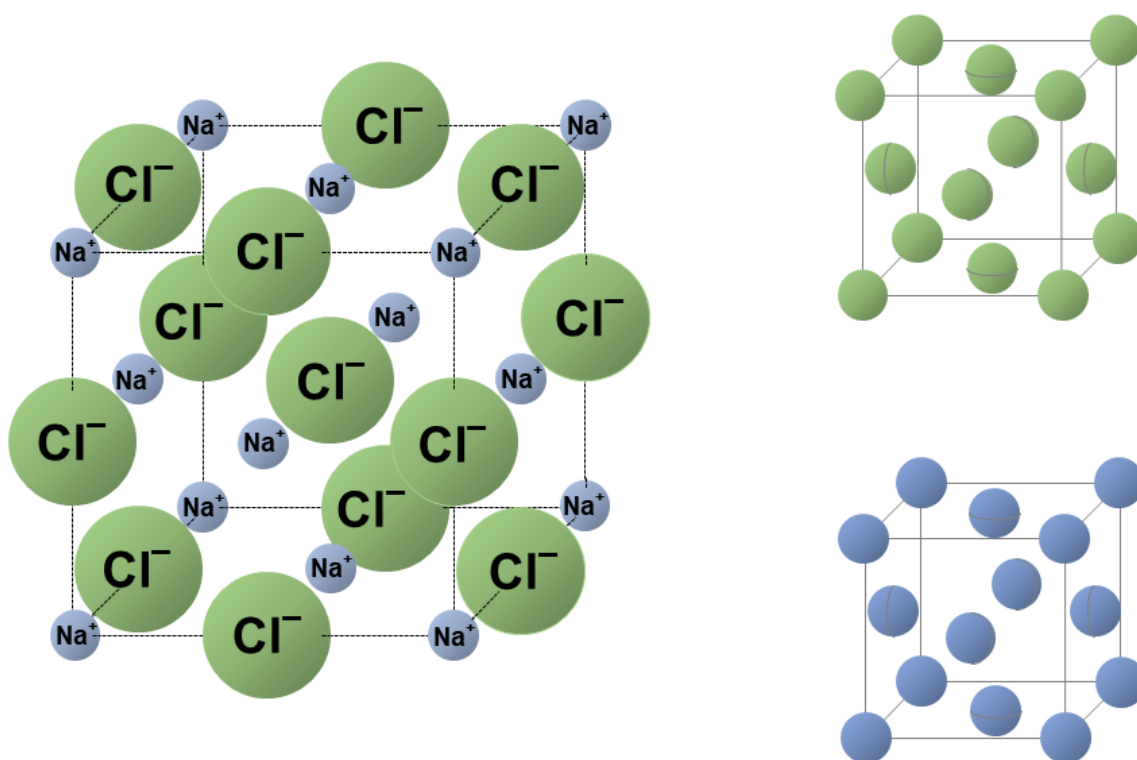


Abbildung 27: Ausschnitt aus der Struktur von Natriumchlorid (Bild links). Elementarzelle aus Chlorid- und Natrium-Ionen ohne entsprechendes Gegenion (Bild rechts).

Die Ecken sowie die Mittelpunkte der Seitenflächen des Würfels werden hier von Natrium-Kationen Na^+ besetzt. Im Raummittelpunkt sowie auf den Kantenmitten dagegen finden sich die Chlorid-Ionen Cl^- als sogenannte Gegenionen, damit sich die elektrischen Ladungen ausgleichen. Mehrere solcher Würfel lassen sich entlang der drei Raumkoordinaten x , y und z nebeneinanderlegen, wobei sich eine räumlich ausgedehnte Struktur ergibt. Folglich ist solch ein Kubus das kleinste Element einer größeren Struktur, das auch als Elementarzelle bezeichnet wird. Nicht nur die Natrium-Kationen, sondern auch die Chlorid-Anionen lassen sich entsprechend auf Eck- und Mittelpunkte der Seitenflächen setzen, während die Na^+ als Gegenionen nun Raum- und Kantenmitten belegen. Man erhält eine kongruente kubische Struktur wie in [Abbildung 25](#),

mit dem Unterschied, dass die Ionen eben ihre Plätze vertauscht haben. Bei genauerer Betrachtung der Elementarzelle fällt zudem auf, dass ein Natrium-Kation von sechs nächsten Chlorid-Anionen umgeben ist, umgekehrt befindet sich auch ein Chlorid-Anion in der Hülle von sechs nächsten Natrium-Kationen, wie in [Abbildung 28](#) dargestellt.

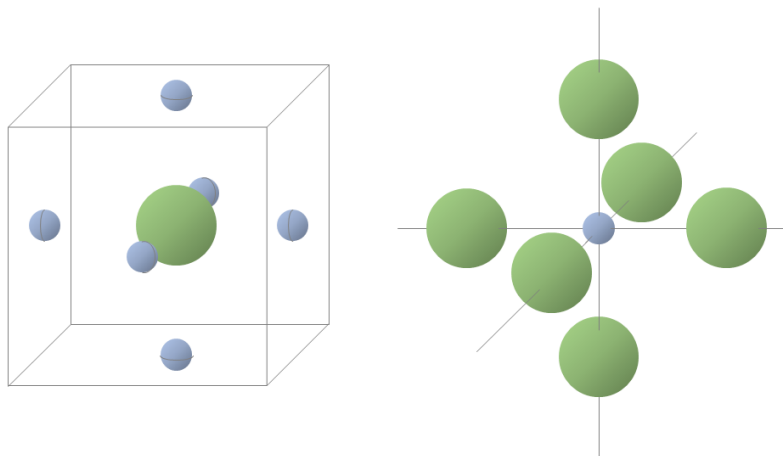


Abbildung 28: Natrium- und Chlorid-Ionen werden jeweils von sechs Gegenionen in der Gestalt eines Oktaeders umgeben.

Die räumliche Anordnung von sechs Ionen um ein Gegenion herum entspricht den Ecken eines **Oktaeders**, eines mathematischen Körpers, dessen Seitenflächen sich ausschließlich aus Dreiecken zusammensetzen. Zu diesen als **Deltaeder** genannten Körpern gehört neben dem Oktaeder auch das **Tetraeder**, nicht jedoch der Würfel ([Abbildung 29](#)).

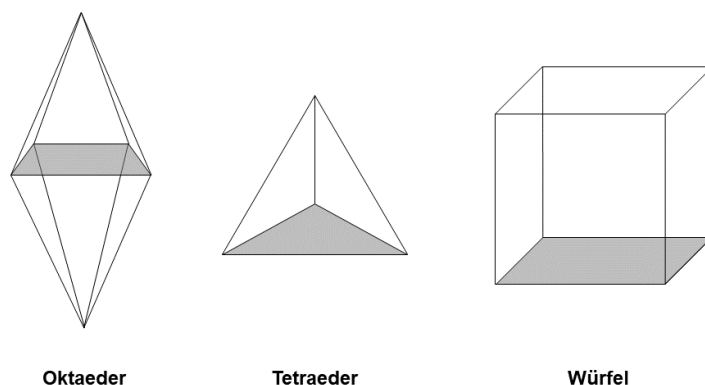


Abbildung 29: Oktaeder, Tetraeder und Würfel als geometrische Körper. Oktaeder und Tetraeder sind Deltaeder.

Auch außerhalb der Komplexchemie bezeichnet man die Zahl der Bindungspartner eines Elements durchaus als **Koordinationszahl** (KZ oder CN von engl.: *coordination number*), obwohl keine koordinativen Bindungen vorliegen. Je nach Koordinationszahl entsteht ein bestimmtes Koordinationspolyeder. Bei sechs Bindungspartnern erhält man ein Oktaeder, bei fünf eine trigonale Bipyramide und bei vier ein Tetraeder. Während sich bei der Benennung von Kationen keine Änderungen im Namen ergeben, sind für die **Nomenklatur von Anionen** einige Regeln zu beachten. Die Namen einiger ausgewählter Anionen von Hauptgruppenelementen sind in [Tabelle 2](#) zusammengefasst.

Tabelle 2: Benennung von Anionen. Je nach Oxidationsstufe des Elements wird die Endung **-id**, **-it** oder **-at** an den Elementnamen angehängt. Die Präfixe **Hypo-** und **Per-** weisen auf eine verminderte oder überhöhte Sauerstoffzahl in den Anionen der entsprechenden Sauerstoffsäuren hin. Einige Anionen sind nur hypothetisch, denn sie sind als starke Oxidationsmittel instabil oder disproportionieren in stabilere Oxidationsstufen.

	F^-	FO^-			
	Fluorid	Hypofluorit			
Halogene (17. Gruppe)	Cl^-	ClO^-	ClO_2^-	ClO_3^-	ClO_4^-
	Chlorid	Hypochlorit	Chlorit	Chlorat	Perchlorat
	Br^-	BrO^-	BrO_2^-	BrO_3^-	BrO_4^-
	Bromid	Hypobromit	Bromit	Bromat	Perbromat
	I^-	IO^-	IO_2^-	IO_3^-	IO_4^-
	Iodid	Hypoiodit	Iodit	Iodat	Periodat
Chalkogene (16. Gruppe)	O^{2-}				
	Oxid				
	S^{2-}		SO_3^{2-}	SO_4^{2-}	
	Sulfid		Sulfit	Sulfat	
	Se^{2-}		SeO_3^{2-}	SeO_4^{2-}	
	Selenid		Selenit	Selenat	
Pnicogene (15. Gruppe)	Te^{2-}		TeO_3^{2-}	TeO_4^{2-}	
	Tellurid		Tellurit	Tellurat	
	N^{3-}	$N_2O_2^{2-}$	NO_2^-	NO_3^-	
	Nitrid	Hyponitrit	Nitrit	Nitrat	
	P^{3-}	PO_2^{2-}	PO_3^{3-}	PO_4^{3-}	
	Phosphid	Hypophosphit	Chlorit	Chlorat	
Tetrale (14. Gruppe)	As^{3-}		AsO_3^{3-}	AsO_4^{3-}	
	Arsenid		Arsenit	Arsenat	
	Sb^{3-}			SbO_4^{3-}	
	Antimonid			Antimonat	
Tetrale (14. Gruppe)	C^{4-}			CO_3^{2-}	
	Carbid			Carbonat	
	Si^{4-}			SiO_3^{2-}	
	Silicid			Silicat	

Metallbindung

Metalle zeichnen sich hauptsächlich durch vier charakteristische Eigenschaften aus: optischer Glanz (Spiegelglanz), mechanische Verformbarkeit (Duktilität), elektrische Leitfähigkeit und Wärmeleitfähigkeit. Ihr Aufbau lässt sich meist aus dicht gepackten kugelförmigen Atomen interpretieren, die über Metallbindungen zusammengehalten werden. Diese resultieren aus einer „Wolke“ aus vielen Elektronen (auch „Elektronengas“ genannt), die sich über alle Metallatomrümpfe erstreckt. Auf diese Weise wird auch die elektrische Leitfähigkeit klar, denn in dieser Wolke sind die Elektronen der Metallatome frei beweglich. Zur Untermauerung dieser These kann auch die bereits bekannte LCAO-MO-Theorie herangezogen werden. Ähnlich zum Wasserstoffmolekül H_2 bilden zwei Metallatome ein bindendes und ein antibindendes MO. Mit einem weiteren Paar an Metallatomen, das mit dem ersten wechselwirkt, kommen zusätzlich ein bindendes und ein antibindendes MO hinzu. Diese Anlagerung von Metallatompaares kann fortgesetzt werden, während die Zahl der beiden Zustände an MO stetig zunimmt. Bei sehr vielen Metallatomen bleiben viele nicht mehr voneinander zu unterscheidende bindende und antibindende Zustände übrig, die wie „Bänder“ aussehen. Dabei wird das bindende Band als **Valenzband**, das antibindende Band als **Leitungsband** bezeichnet. Ein verallgemeinertes Schema dieses Bändermodells ist in [Abbildung 30](#) verbildlicht.

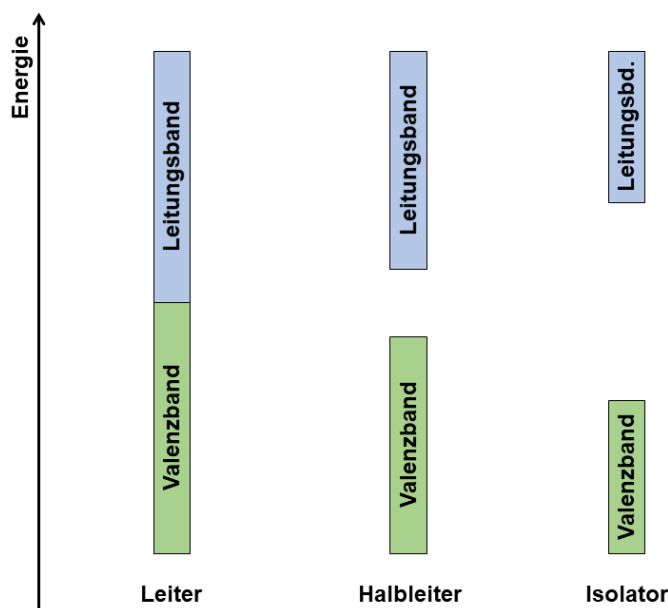


Abbildung 30: Bändermodell für einen elektrischen Leiter, Halbleiter und Nichtleiter (Isolator).

Es wird ersichtlich, dass bei einem elektrischen Leiter die Elektronen problemlos vom Valenzband ins Leitungsband wechseln können, um im elektrischen Feld Ladung transportieren zu können. Dies ist auch im Einklang mit der Beschreibung der elektrischen Leitfähigkeit von Metallen durch eine Wolke aus delokalisierten Elektronen. Im Gegensatz hierzu ist bei Halbleitern eine Energielücke zwischen Valenz- und Leitungsband erkennbar, die aber durch Zufuhr von Wärme oder Licht überwunden werden kann. Erst durch diese energetische Hilfestellung kommt es zur elektrischen Leitfähigkeit. Beim Nichtleiter schließlich kann diese Bandlücke nicht mehr überwunden werden. Der Transport von

Ladungen ist somit ausgeschlossen. Diese Materialien haben eine isolierende Eigenschaft gegenüber elektrischem Stromfluss und elektrischer Spannung. Zu den Metallen zählen im Periodensystem der Elemente die Gruppe der Alkalimetalle ohne Wasserstoff (1. Gruppe), die Gruppe der Erdalkalimetalle (2. Gruppe), die Übergangsmetalle (3. bis 12. Gruppe, wobei die Gruppen der sogenannten f-Elemente Lanthan bis Lutetium und Actinium bis Lawrencium vernachlässigt werden) sowie die Elemente Aluminium, Gallium, Indium, Thallium, Zinn, Blei und Bismut. Halbmetallisch sind die Elemente Bor, Silicium, Germanium, Arsen, Antimon, Tellur und Polonium.

Der Aufbau von Feststoffen

Bei der Betrachtung der drei Aggregatzustände gasförmig, flüssig und fest enthalten doch Feststoffe die meisten Informationen über ihre Zusammensetzung, insbesondere über ihren strukturellen Aufbau. Dabei strebt die Natur die höchsten Formen der Symmetrie an, die sich nicht nur im Mikroskopischen, in der Kristallstruktur, aber auch im Makroskopischen, im Aussehen von Festkörpern niederschlagen. Nicht zufällig sind Kristalle von Natriumchlorid meist kleine Würfel.

Elementarzellen

Das kleinste Merkmal, aus dem eine größere Struktur immer wieder reproduziert werden kann, heißt **Elementarzelle** (EZ). Durch die Aneinanderreihung mehrerer Elementarzellen entlang der drei Raumrichtungen x , y und z im Dreidimensionalen gelangt man schließlich zur Kristallstruktur des Feststoffes, wie in *Abbildung 31* dargestellt.

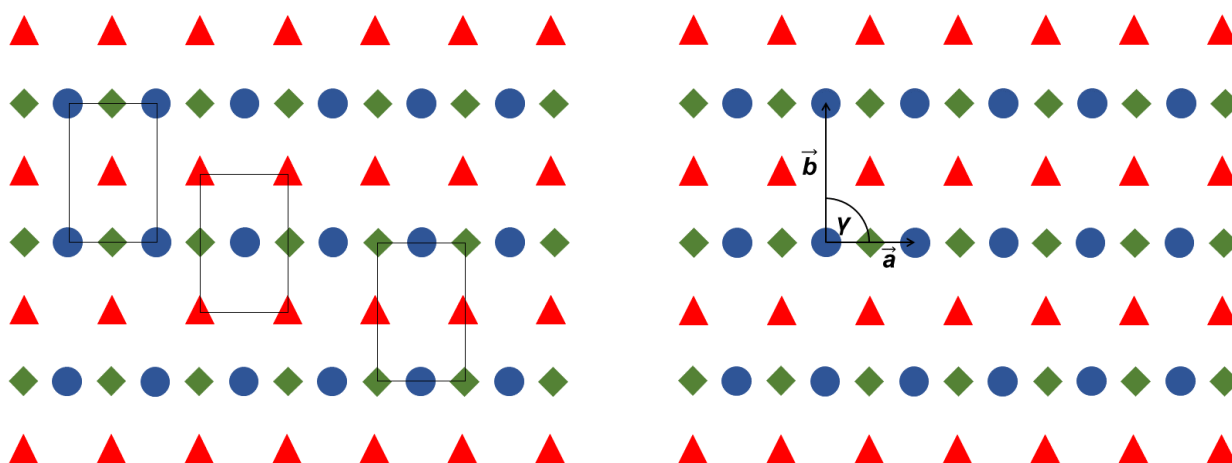


Abbildung 31: Muster mit möglichen Elementarzellen (Bild links). Zu jeder einzelnen lassen sich ein Kreis, ein Dreieck und eine Raute zuordnen. Gitterkonstanten $\vec{a}$, $\vec{b}$ und γ der Elementarzellen (Bild rechts).

Im Allgemeinen sind Elementarzellen Parallelelogramme. Das bedeutet, die Winkel müssen nicht zwangsweise wie im Beispiel in [Abbildung 31](#) einen Wert von 90° besitzen. Um die Elementarzelle einer vorliegenden Struktur zu ermitteln, wählt man zunächst einen Punkt mit einer definierten Umgebung. Danach werden alle anderen Punkte in der Struktur mit der exakt gleichen Umgebung gekennzeichnet. Durch Verbindung dieser Punkte mit ihren nächsten Nachbarn erhält man ein **Punktgitter**. Die Abstände eines Gitterpunktes zu seinen nächsten Nachbargitterpunkten entlang der drei Raumrichtungen werden zwar als Vektoren $\vec{a}$, $\vec{b}$ und $\vec{c}$ dargestellt, sind aber hauptsächlich als Kantenlängen der Elementarzelle, die sie aufspannen, zu verstehen. Ihre Beträge a , b und c sowie die Winkel α , β und γ , die sie einschließen, werden als **Gitterkonstanten** zusammengefasst. Anhand dieser Parameter lässt sich eine Elementarzelle eindeutig festlegen, wie in [Abbildung 32](#) zu sehen.

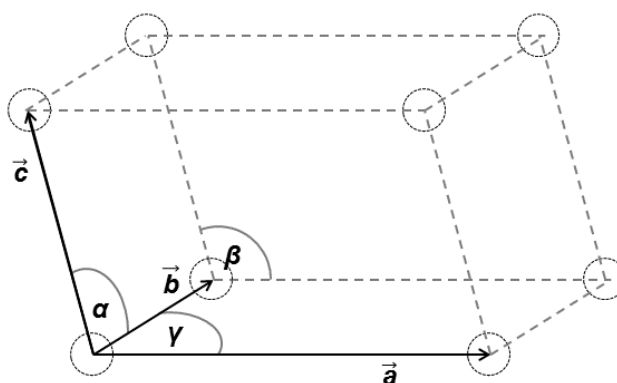


Abbildung 32: Elementarzelle mit den Basisvektoren $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ sowie den Winkeln α , β und γ .

Ähnlich zu [Abbildung 30](#) wurden auch im Eingangsbeispiel rote Dreiecke mit roten Dreiecken, blaue Kreise mit blauen Kreisen und grüne Rauten mit grünen Rauten verbunden. In allen drei Fällen gehören die vier Formen nur zu einem Viertel zur Elementarzelle. Mit $4 \cdot \frac{1}{4} = 1$ enthält die Elementarzelle nur einen Gitterpunkt. Folglich ist sie **primitiv**. Neben primitiven EZ gibt es **raumzentrierte** und **flächenzentrierte**, siehe [Abbildung 33](#) am Exempel einer kubischen Elementarzelle.

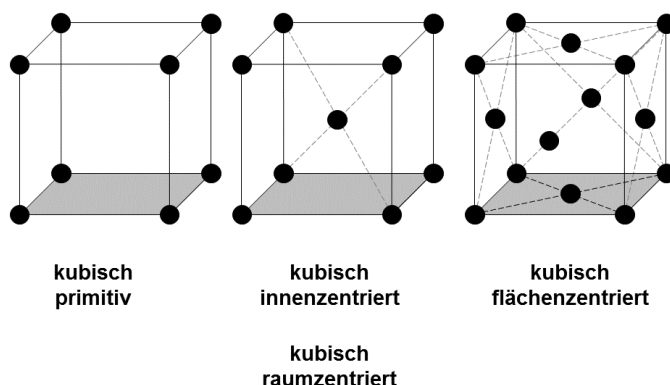


Abbildung 33: Übersicht über die kubisch primitive, kubisch innenzentrierte und kubisch flächenzentrierte Elementarzelle.

Dichteste Kugelpackungen

Den Strukturen von Metallen und Salzen liegen dichteste Kugelpackungen zugrunde. Dabei werden Atome oder Ionen gedanklich als Kugeln so dicht wie möglich gepackt, und zwar, indem sie Schicht für Schicht übereinandergestapelt werden. Hierfür gibt es zwei wesentliche Möglichkeiten: zunächst bildet man eine zweidimensionale Schicht A aus dicht aneinander gereihten Kugeln. Nun wird eine zweite solche dicht gepackte Kugelschicht B so über der ersten platziert, dass die Kugeln von B in den Lücken oder Mulden von Schicht A liegen. Setzt man eine dritte Schicht über B, so ergeben sich hier eben zwei Möglichkeiten. Zum einen können die Kugeln dieser dritten Schicht so in die Lücken von Schicht B positioniert werden, dass sie sich exakt über den Kugeln von Schicht A befinden. Folglich ist diese dritte Kugelschicht identisch mit Schicht A. Eine Seitenansicht solch eines Kugelstapels ist [Abbildung 34](#) zu entnehmen.

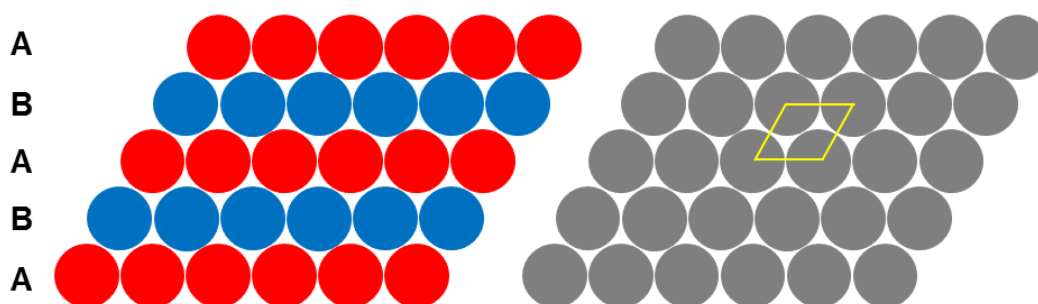


Abbildung 34: Sichtfolge einer hexagonal dichtesten Kugelpackung (hcp). Seitenansicht des Kugelstapels.

Der Vorgang lässt sich mit einer vierten Kugelschicht, die mit Schicht B übereinstimmt, fortsetzen. Die dichteste Kugelpackung, die aus der Schichtfolge ABABABAB... resultiert, heißt **hexagonal dichteste Kugelpackung**, kurz: **hcp** von engl.: *hexagonal closest packing*. Eine beliebige Kugel einer Schicht wird von sechs nächsten Kugeln umgeben, die sich in Form eines gleichmäßigen Sechsecks anordnen. Zu den Elementen, deren Kristallstruktur der hexagonal dichtesten Kugelpackung entspricht, gehören unter anderen Beryllium, Magnesium, Scandium, Titan, Cobalt, Zink, Yttrium, Zirkonium, Cadmium, Hafnium, und Thallium. [Abbildung 35](#) verdeutlicht die Lage der Kugelschichten in der Folge ABA aus der Vogelperspektive.

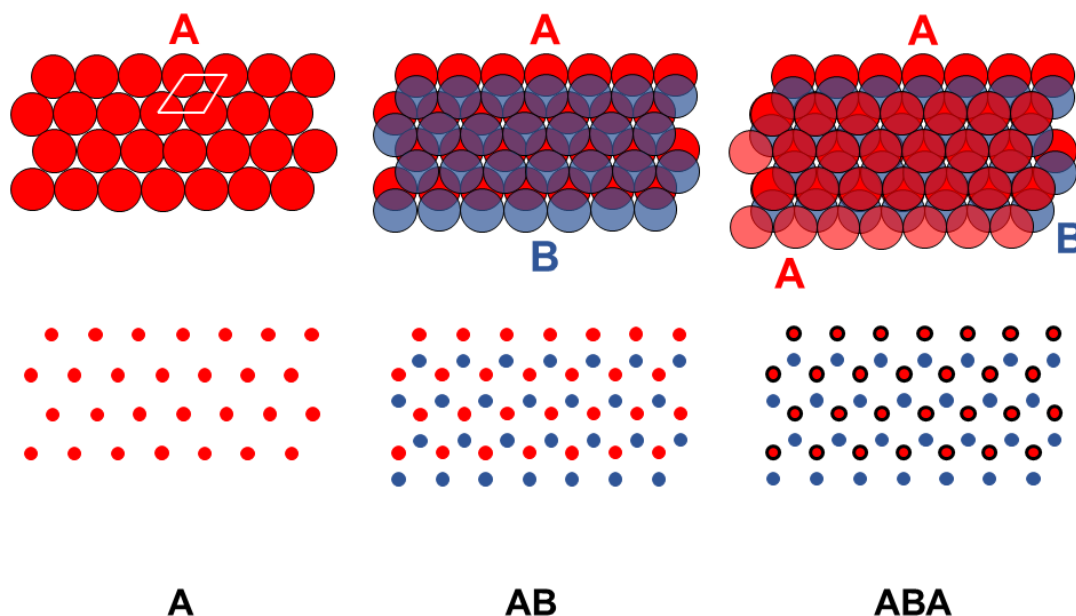


Abbildung 35: Schichtfolge der hexagonal dichtesten Kugelpackung aus der Vogelperspektive.

Die zweite Möglichkeit die dritte Schicht über B zu legen ist in [Abbildung 36](#) bildlich dargestellt. In diesem Fall ist sie mit keiner der beiden vorhergehenden vergleichbar und kann als eigenständige Schicht C bezeichnet werden.

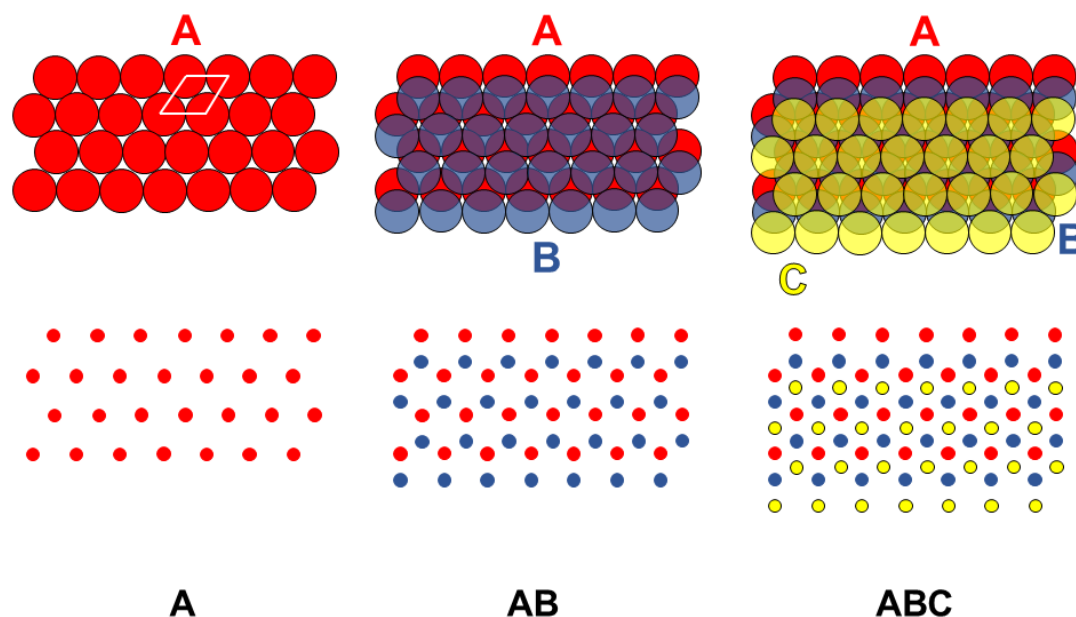


Abbildung 36: Schichtfolge ABC der kubisch dichtesten Kugelpackung aus der Vogelperspektive.

Analog zu hcp lässt sich auch diese Folge ABCABCABC... von Kugelschichten in beliebiger Wiederholung ausführen und wird allgemein als **kubisch dichteste Kugelpackung** genannt oder kurz: **ccp** von engl.: *cubic closest packing*. Warum

gerade kubisch? Hierfür lohnt es sich, die Elementarzelle näher anzuschauen. Diese kann über einen Ausschnitt aus der Kugelpackung abgeleitet werden, wie in [Abbildung 37](#) gezeigt.

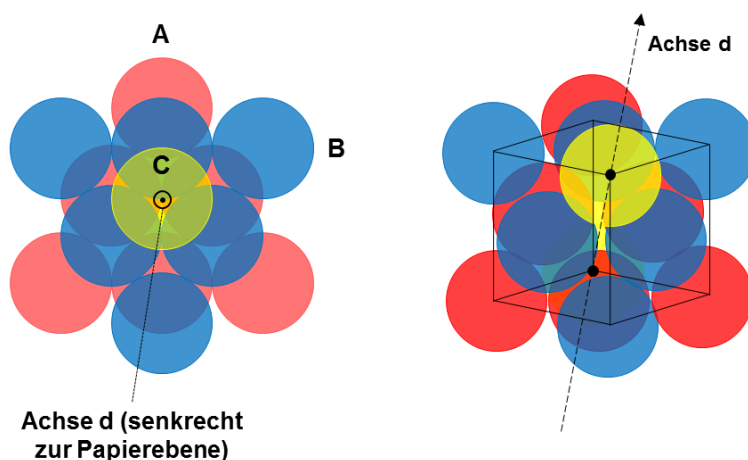


Abbildung 37: Sichtfolge einer kubisch dichtesten Kugelpackung und Darstellung der zugehörigen Elementarzelle.

Über sechs Kugeln von Schicht A (in [Abbildung 37](#) rot markiert) werden zunächst sechs Kugeln von Schicht B (blau) entsprechend in die Lücken gelegt. Danach wird eine Kugel von Schicht C (gelb) auf B positioniert. In der gleichen Lücke unterhalb Schicht A befindet sich ebenfalls eine gelbe Kugel von C. Dreht man nun diese Stapelachse d der Schichten A, B und C um etwa 35° erhält man einen Würfel, an dessen Ecken und Mittelpunkten der Seitenflächen jeweils eine Kugel sitzt. Unter den Elementarzellen heißt diese eine **kubisch flächenzentrierte** Elementarzelle, auch als **fcc** abgekürzt von engl.: *face centered cubic* (vgl.: [Abbildung 33](#)). Eine vereinfachte, punktuelle Darstellung bietet [Abbildung 38](#).

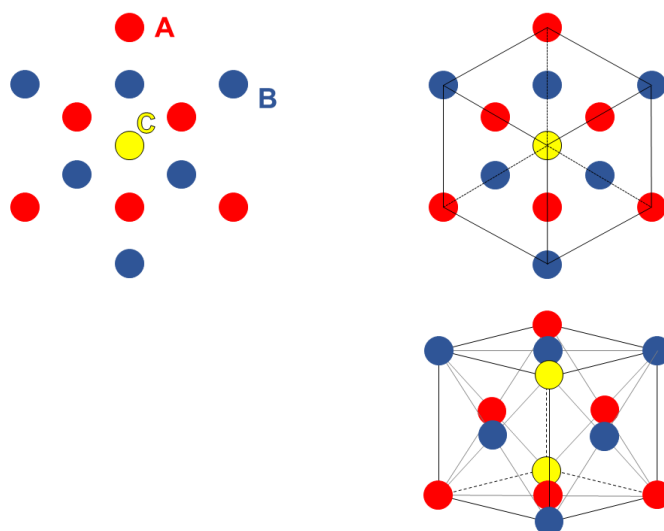


Abbildung 38: Kubisch flächenzentrierte Elementarzelle einer kubisch dichtesten Kugelpackung.

Elemente, deren Kristallstruktur nach dem Prinzip der kubisch dichtesten Kugelpackung aufgebaut ist, sind beispielsweise Calcium, Nickel, Kupfer, Strontium, Rhodium, Palladium, Silber, Indium, Iridium, Platin, Gold, Quecksilber und Blei. Die Raumfüllung der Elementarzellen, das heißt der Anteil der Atome am Volumen einer Elementarzelle der dichtesten Kugelpackungen kann am besten über die kubisch flächenzentrierte Elementarzelle berechnet werden. Hierfür werden die Berührungspunkte der Kugeln mit einem beliebigen Radius r auf einer der sechs Seitenflächen des Würfels mit der Kantenlänge a betrachtet, wie in [Abbildung 39](#) veranschaulicht.

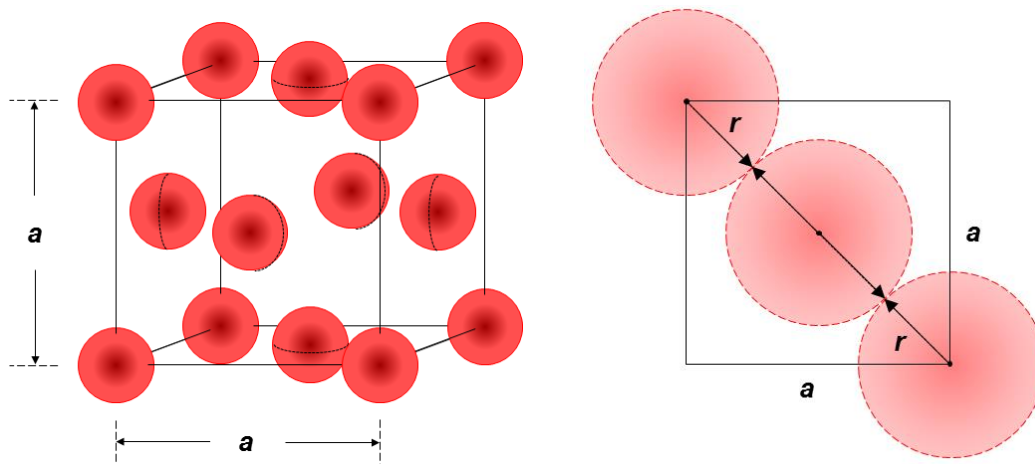


Abbildung 39: Kubisch flächenzentrierte Elementarzelle (links) und Seitenfläche der kubisch flächenzentrierten Elementarzelle mit Berührungspunkten der Atome/Kugeln (rechts).

Zu Beginn steht fest, wie das Volumen einer Kugel V_K und das Volumen des Würfels V_W definiert sind, nämlich:

$$V_K = \frac{4}{3}\pi r^3 \quad \text{und} \quad V_W = a^3 \quad (\text{Gl. 26})$$

Mit den Berührungspunkten der Kugeln auf einer der Seitenflächen können der Radius der Kugeln r und die Kantenlänge a des Würfels in Zusammenhang gebracht werden:

$$4r = \sqrt{2}a \quad \text{oder} \quad r = \frac{\sqrt{2}}{4}a \quad (\text{Gl. 27})$$

Eingesetzt in Gl. 26 kann V_K nun in Abhängigkeit von a ausgedrückt werden.

$$V_K = \frac{4}{3}\pi \cdot \left(\frac{\sqrt{2}}{4}a\right)^3 = \frac{\sqrt{2}}{24}\pi a^3 \quad (\text{Gl. 28})$$

Es muss aber berücksichtigt werden, dass die acht Kugeln an den Ecken des Würfels nur zu einem Achtel und die sechs Kugeln in den Mittelpunkten der Seitenflächen nur zur Hälfte zur Elementarzelle gehören. Folglich enthält sie nur vier ganze Kugeln, denn $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$. Mit

$$\frac{4V_K}{V_W} = \frac{\frac{4\sqrt{2}}{24}\pi a^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi \approx 0,7405 \quad (\text{Gl. 29})$$

ergibt sich für die vier Kugeln eine Raumbfüllung der Elementarzelle von etwa 74%. In analoger Weise lässt sich die Raumbfüllung auch für den kubisch primitiven und den kubisch innenzentrierten Fall bestimmen. Für letztere zählen die Elemente Lithium, Natrium, Kalium, Vanadium, Chrom, Eisen, Rubidium, Niob, Molybdän, Cäsium, Barium, Tantal, Wolfram und Radium zu Vertretern mit der entsprechenden Elementarzelle in ihren Kristallstrukturen. Es ist zu beachten, dass für eine Elementarzelle nur Atome oder Ionen einer Sorte in Frage kommen. So ist die Elementarzelle von Caesiumchlorid CsCl kubisch primitiv (*Abbildung 40*).

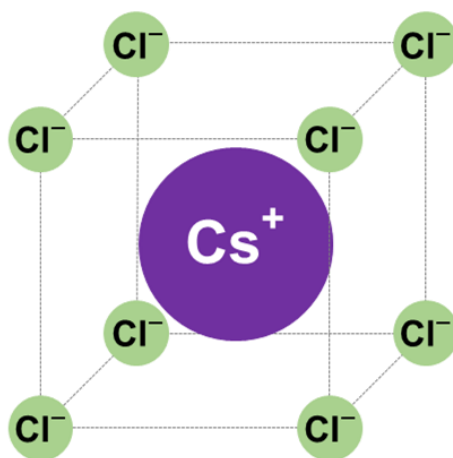


Abbildung 40: Kubisch primitive Elementarzelle von Caesiumchlorid CsCl.

Die Ecken des Würfels werden von Chlorid-Ionen besetzt, während das größere Caesium-Kation in der Raummitte seinen Platz einnimmt. Es wird klar, dass die Größenunterschiede der Ionen die Elementarzelle von Salzen beeinflussen, ob kubisch flächen-, innenzentriert oder primitiv. Gerade bei Salzen sind zunächst diejenigen Ionen von Bedeutung, die die Elementarzelle aufspannen. Dies ist bei sogenannten **AB-Strukturen** mit einer Ionensorte A und einer Ionensorte B im Verhältnis eins zu eins wie beispielsweise bei NaCl oder CsCl noch verhältnismäßig trivial, denn sowohl bei Natriumchlorid bilden Na^+ und Cl^- mit ihren benachbarten Na^+ und Cl^- eine kubisch flächenzentrierte Elementarzelle als auch bei Caesiumchlorid ergeben Cs^+ und Cl^- eine kubisch primitive Elementarzelle, wie in *Abbildung 41* verdeutlicht.

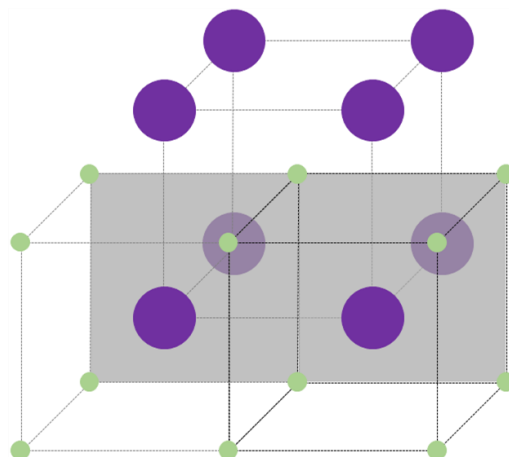


Abbildung 41: Sowohl die Chlorid-Ionen (grün) als auch die Caesium-Ionen (violett) bilden mit ihren entsprechenden benachbarten Ionen eine kubisch primitive Elementarzelle.

Sind die für die Elementarzelle relevanten, packungsbildenden Ionen dagegen in einer hexagonal oder kubisch dichtesten Kugelpackung oder gemäß einer kubisch raumzentrierten Elementarzelle angeordnet, erhält man eine Vielzahl anderer Strukturen, unter anderen die von Zinkblende ZnS , Wurtzit ZnO und Nickelarsenid NiAs . Auch AB_2 -Strukturen wie Calciumfluorid CaF_2 bauen hierauf auf. Diese Strukturtypen haben gemeinsam, dass in den Elementarzellen aufgrund der geeigneten oder passenden Größe des Gegenions sogenannte **Tetraeder-** oder **Oktaederlücken** besetzt werden können. [Abbildung 42](#) zeigt anhand der kubisch flächenzentrierten Elementarzelle, wo sich diese Lücken befinden.

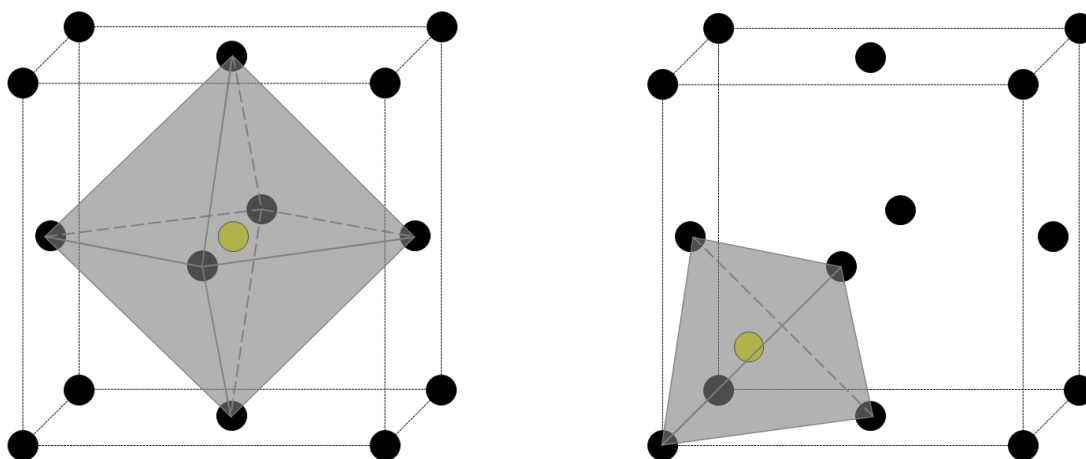


Abbildung 42: Oktaederlücke (gelb im linken Bild) und Tetraederlücke (gelb im rechten Bild) in einer kubisch flächenzentrierten EZ.

In einer kubisch flächenzentrierten Elementarzelle befinden sich insgesamt vier Oktaederlücken und acht Tetraederlücken. Entsprechend haben Atome oder Ionen in solchen Lücken sechs (Oktaeder) beziehungsweise vier (Tetraeder) nächste Nachbarn.

Von Feststoffen zu Lösungen

Wird beispielsweise ein Salz wie Natriumchlorid NaCl in Wasser gelöst, so sind zwei wichtige Parameter zu beachten. Zum einen die Masse m des gelösten Stoffes, folglich von NaCl , und das Volumen V des Lösemittels, hier das von Wasser. Durch den Quotienten aus m und des resultierenden Gesamtvolumens V_{ges} aus Salz und Wasser kann eine sogenannte **Massenkonzentration** angegeben werden. In der Praxis gängiger jedoch ist die Umrechnung der Masse eines beliebigen gelösten Stoffes X in seine Stoffmenge, sodass man schließlich die **Stoffmengenkonzentration** $c(X)$ oder c_X , meist als **Konzentration** abgekürzt oder **Molarität** genannt, erhält. Es gilt:

$$c(X) = \frac{n(X)}{V_{\text{ges}}} \quad (\text{Gl. 30})$$

Die Einheit lautet in der Chemie entsprechend $\frac{\text{mol}}{\text{L}}$ oder $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$, obwohl aus den SI-Einheiten $\frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$ abzuleiten wäre. Spätestens beim Massenwirkungsgesetz und bei der Definition des pH-Werts, siehe [Säuren und Basen](#), allerdings ist festzustellen, dass Einheiten stören. Hier werden **Standardkonzentrationen** formuliert, die sich auf das Vielfache einer Konzentration von $1 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$ beziehen. In der Schreibweise wird dies für einen beliebigen Stoff X mit $[X]$ gekennzeichnet. Allgemein können Standardkonzentrationen daher wie folgt zusammengefasst werden:

$$[X] = \frac{c(X)}{\frac{\text{mol}}{\text{L}}} \quad (\text{Gl. 31})$$

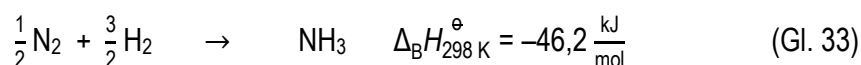
Darüber hinaus werden Konzentrationsangaben oft auch als Molarität vereinfacht. Eine **0,5 molare** wässrige Natriumchlorid-Lösung, auch als **0,5 M** NaCl -Lösung geschrieben, besitzt demzufolge eine Konzentration von $0,5 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$. Anders dagegen die Konzentration eines Stoffes X bezüglich der Masse des eingesetzten Lösemittels L . Diese als **Molalität** b betitelte Konzentration ist definiert als:

$$b(X) = \frac{n(X)}{m(L)} \quad (\text{Gl. 32})$$

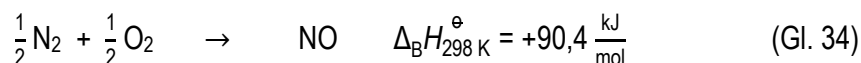
Energie und Enthalpie

Sowohl bei Lösungsvorgängen als auch bei chemischen Reaktionen allgemein kommt es neben der Umverteilung von Atomen auch zur Umsetzung von Energie. Wird etwa Ammoniumnitrat NH_4NO_3 in Wasser gelöst, ist ein deutliches Sinken der Temperatur der Lösung zu spüren. Dagegen erhitzt sich im Falle von Natriumhydroxid NaOH die Lösung sehr rasch, sodass hier in der praktischen Durchführung in der Regel gekühlt werden muss. Analog hierzu wird auch bei chemischen Reaktionen entweder Wärme freigesetzt oder verbraucht. Diese Wärme wird als Reaktionswärme bezeichnet. Unter der Annahme eines konstanten Drucks heißt die Reaktionswärme schließlich **Reaktionsenthalpie** $\Delta_R H$. Sie wird meist in Joule oder Kilojoule bezogen auf ein mol des gebildeten Produkts, folglich in $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$, angegeben. Sind die Edukte einer Reaktion ausschließlich Elemente, dann spricht man von einer **Bildungsenthalpie** $\Delta_B H$. Unter Standardbedingungen, das

heißt bei einem Gesamtdruck von $p = 1,013 \text{ bar} = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ und einer Temperatur von $T = 298,15 \text{ K} = 25^\circ\text{C}$, werden die Symbole $\Delta_R H$ und $\Delta_B H$ mit dem Superskript $^\ominus$ gekennzeichnet. Für die Synthese von Ammoniak NH_3 gilt:



Für die Herstellung von Stickstoffmonoxid NO aus den Elementen Stickstoff und Sauerstoff bedarf es der Zufuhr von Energie, denn:



Die Bildungsenthalpie von Elementen ist per Definition 0, allerdings in der energieärmsten, günstigsten und stabilsten Modifikation. So ist bei Kohlenstoff beispielsweise eben Graphit gemeint und nicht Diamant, bei Stickstoff N_2 und nicht N. Die Standardreaktionsenthalpie $\Delta_R H^\ominus$ einer beliebigen chemischen Reaktion kann als Differenz der Summe der Standardbildungsenthalpien der Produkte und der Summe der Standardbildungsenthalpien der Edukte gesehen werden. Kurz:

$$\Delta_R H_{298 \text{ K}}^\ominus = \sum \{ \Delta_B H_{298 \text{ K}}^\ominus (\text{Produkte}) \} - \sum \{ \Delta_B H_{298 \text{ K}}^\ominus (\text{Edukte}) \} \quad (\text{Gl. 35})$$

Wird bei einer chemischen Reaktion Energie freigesetzt, $\Delta_R H < 0$, so heißt sie **exotherm**, wird dagegen Energie verbraucht, $\Delta_R H > 0$, nennt man sie **endotherm**. Auch, wenn eine Reaktion exotherm verläuft, kann es durchaus vorkommen, dass diese zunächst Energie benötigt, damit sie ablaufen kann. Diese Energie wird allgemein als **Aktivierungsenergie** E_a bezeichnet. Der energetische Verlauf solch einer exothermen Reaktion mit Aktivierungsenergie ist in [Abbildung 43](#) dargestellt.

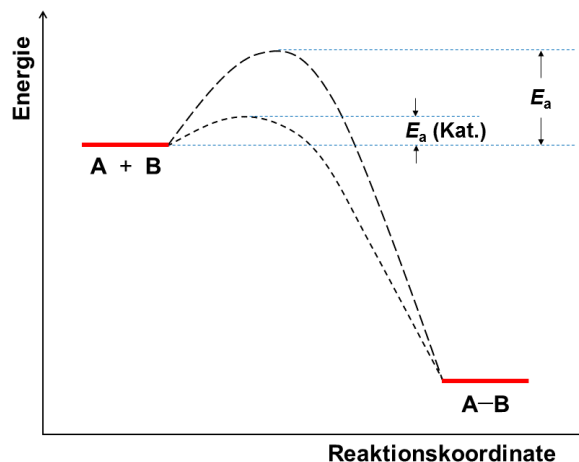


Abbildung 43: Energetischer Verlauf einer exothermen Reaktion mit Aktivierungsenergie E_a sowie mit und ohne Katalyse.

Um die Aktivierungsenergie zu senken, werden in biologischen Systemen spezielle Enzyme und in der Industrie eigens für bestimmte Prozesse entwickelte Feststoffgemische als **Katalysatoren** eingesetzt, die für Gleichgewichtsreaktionen im Skript [Säuren und Basen](#) ausführlicher diskutiert werden. Vor allem das Element Stickstoff spielt dabei sowohl in der Biosphäre als auch in der Chemieindustrie für katalysierte Reaktionen eine derart essentielle Rolle, dass heutzutage angenommen darf, dass die Hälfte aller im menschlichen Körper vorkommenden Stickstoffatome auch einen Haber-Bosch-Reaktor für die Ammoniak-Synthese bereits durchlaufen hat. Katalyse ist aus unserem Leben nicht wegzudenken.

Lehrbücher

- [1] C. E. Mortimer, U. Müller, *Chemie – Das Basiswissen der Chemie*, Georg Thieme Verlag Stuttgart – New York, 8. Auflage, **2003**, ISBN: 978-3-13-484310-1.
- [2] J. Strähle, E. Schweda, *Jander-Blasius – Lehrbuch der analytischen und präparativen anorganischen Chemie*, S. Hirzel Verlag Stuttgart, 16. Auflage, **2006**, ISBN-10: 3-7776-1388-6, ISBN-13: 978-3-7776-1388-8.
- [3] E. Riedel, C. Janiak, *Anorganische Chemie*, Walter de Gruyter & Co. Berlin, New York, 8. Auflage, **2012**, ISBN: 978-3-11-022566-2.
- [4] M. Binnewies, M. Jäckel, H. Willner, G. Rayner-Canham, *Allgemeine und Anorganische Chemie*, Spektrum Akademischer Verlag, 2. Auflage, **2010**, ISBN: 978-3-8274-2533-1.
- [5] A. F. Hollemann, N. Wiberg, *Anorganische Chemie*, Walter de Gruyter & Co. Berlin, New York, 103. Auflage, **2017**, ISBN: 978-3-11-051854-2.

Tüftelecke

Aufgabe 1: Zeichne das Energieschema der Molekülorbitale (MO) für Stickstoff N_2 und Stickstoffmonoxid NO. Berechne anhand der MO-Methode die Bindungsordnung von Kohlenmonoxid CO und Chlor Cl_2 .

Aufgabe 2: Gib die Elektronenkonfiguration folgender Elemente / Ionen an: Na^+ , Cl^- , P, Fe^{2+} , Cu^{2+} und Sn^{4+} .

Aufgabe 3: Zeichne die Lewis-Strukturformeln unter Beachtung der Oktett-Regel und Angabe von freien Elektronenpaaren von Sulfat SO_4^{2-} , Wasserstoffperoxid H_2O_2 , Kohlendioxid CO_2 und dem Nitrosonium-Kation NO^+ .

Aufgabe 4: Berechne die Stoffmenge von 4 g Quarzsand SiO_2 , 1,3 g Natriumchlorid $NaCl$, 55 mg Kaliumhydrogenphosphat K_2HPO_4 und 3 L Sauerstoff O_2 sowie 6 L Wasserstoff H_2 mit der Annahme, dass Gase ideales Verhalten zeigen.

Aufgabe 5: 3,0 g elementares Eisen Fe soll mit Schwefelpulver S vollständig zu Eisen(II)-sulfid FeS reagieren. Berechne die stöchiometrisch erforderliche Masse an Schwefel und die Masse des gebildeten Produkts.

Aufgabe 6: 600 mL einer 5 M wässrigen Salzsäure-Lösung HCl soll mit festem Kaliumhydroxid KOH neutralisiert werden, d. h. vollständig zu Kaliumchlorid KCl umgesetzt werden. Berechne die Masse des stöchiometrisch benötigten KOH und die Konzentration des gebildeten Produkts unter Vernachlässigung der Volumenzunahme durch Zugabe des Feststoffes.

Aufgabe 7: Berechne die Raumfüllung einer kubisch raumzentrierten und kubisch primitiven Elementarzelle.