

Chemie für Medizintechnik

Zusammenfassung

Leonie W.
SS 2019 Tübingen

1.	Atombau	3
1.)	Elementarteilchen und Atombau	3
2.)	Elemente und Isotope	3
3.)	Atommasse, Stoffmenge	4
4.)	Elektronenhülle	4
5.)	Periodensystem	6
2.	Die chemische Bindung	7
1.)	Oktettregel und Bindungsarten.....	7
2.)	Ionische Bindung	7
3.)	Metallische Bindung	8
4.)	Kovalente Bindung	9
3.	Zustandsformen, Phasengleichgewichte.....	11
1.)	Aggregatzustände	11
2.)	Zwischenmolekulare Wechselwirkungen.....	11
3.)	Phasenumwandlungen	12
4.)	Gemische und Phasengleichgewichte	12
4.	Chemische Reaktionen und Kinetik, Thermodynamik	15
1.)	Reaktionsgleichungen	15
2.)	Thermodynamik	15
3.)	Kinetik.....	17
4.)	Chemisches Gleichgewicht	17
5.)	Säuren und Basen	18
1.)	Säure-Base-Definition (nach Broensted)	18
2.)	pH-Wert.....	18
3.)	Stärke von Säuren und Basen.....	18
4.)	Titration	19
5.)	Puffer	20
6.)	Redoxreaktionen	21
1.)	Definition, Konzept.....	21
2.)	Oxidationszahlen, Redoxgleichungen	21
3.)	Elektrochemische Zelle.....	22
4.)	Elektromotorische Kraft	23
5.)	Nernst'sche Gleichung.....	23
6.)	Elektrolyse	24
7.)	Organische Chemie: Allgemein	25

1.)	Einführung in die organische Chemie.....	25
2.)	Bindungsverhältnisse am Kohlenstoff.....	25
3.)	Verbindungsklassen.....	26
4.)	Organische Reaktionen	26
8.)	Kohlenwasserstoffe	29
1.)	Alkane	29
2.)	Alkene.....	30
3.)	Alkine	30
4.)	Aromaten.....	30
9.)	Organische Chemie: Einfache funktionelle Gruppen	32
1.)	Stereoisomerie	32
	Übersicht Isomerie:	32
	Chiralität:	32
2.)	Alkohole, Ether, Halogenalkane, Amine.....	33
3.)	S _N 2 Reaktion	34
4.)	S _N 1 Reaktion	34
5.)	Carbonylverbindungen, Carbonsäuren	35

1. Atombau

1.) Elementarteilchen und Atombau

- Elementarladung $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- Atomare Masseneinheit $u = 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1 \text{ Da}$
- Atom = neutral ($n_{\text{Protonen}} = n_{\text{Elektronen}}$); Ion = geladen ($n_{\text{Protonen}} \neq n_{\text{Elektronen}}$)

Elementarteilchen:

- Neutronen n (keine Ladung)
- Protonen p (Ladung $+e$)
- Elektronen e (Ladung $-e$)

Atomkern

- Positiv geladen, besteht aus Protonen und Neutronen
- Geringer Durchmesser, aber Hauptanteil der Masse des Atoms
- Anzahl n Neutronen $\geq n$ Protonen
- Isotopenchemie, radioaktiver Zerfall, Kernfusion

Atomhülle

- Negativ geladen, Elektronen
- Großer Durchmesser, kaum Masse
- Verantwortlich für chemische Eigenschaften des Atoms (äußere Elektronen), chemische Bindung, Reaktivität

2.) Elemente und Isotope

Element (vgl. PSE): ${}_Z^A M$ mit Z =Ordnungszahl (=Protonenzahl=Elektronenzahl); M = Elementsymbol;
 A = Massezahl = $p + n$

→ Elemente sind Atome gleicher Ordnungszahl (Protonenzahl)

Isotope

- Atome gleicher Ordnungszahl (Z), unterschiedliche Massezahl (A) → unterschiedliche Anzahl Neutronen
- Z.B. ${}^{12}_6\text{C}$ und ${}^{13}_6\text{C}$
- Isotope Wasserstoff: Protium ($n=0$), Deuterium ($n=1$), Tritium ($n=2$)
- Isotope schwerer Elemente ab Po und Tc radioaktiv (spontaner Zerfall → Radioaktivität)

Radioaktive Strahlung

Reichweite:

- α -Strahlung: Luft cm; Gewebe μm
- β -Strahlung: Luft cm-m; Gewebe cm
- γ -Strahlung: Luft km

Strahlung	Zerfallsvorgang	Veränderte Eigenschaften des neu entstandenen Kerns	
		Ordnungszahl	Massenzahl
α	Abspaltung von Heliumkernen ${}^4_2\text{He} = 2 {}^1_1\text{p} + 2 {}^1_0\text{n}$	-2	-4
β^-	Umwandlung eines Neutrons in ein Proton unter Aussendung eines Elektrons: ${}_0^1\text{n} \rightarrow {}^1_1\text{p} + {}^0_{-1}\text{e}$	+1	± 0
β^+	Umwandlung eines Protons in ein Neutron unter Aussendung eines Positrons: ${}_1^1\text{p} \rightarrow {}^1_0\text{n} + {}^0_{+1}\text{e}$	-1	± 0
γ	Abstrahlung von Energie (= Photonen)	± 0	± 0

Positron =
Antiteilchen
Elektron

Medizintechnik: Tumore können nach Einnahme radioaktiver Stoffe mittels PET (Positron-Emissions-Tomographie) erkannt werden

3.) Atommasse, Stoffmenge

Atommasse

- Angabe der relativen Atommasse in u (p: 1,0073u; n: 1.0087u; e: 0,0005u)
- ${}^{12}_6\text{C} = 12,000\text{u}$ (nach Definition); ${}^{23}_{11}\text{Na} \approx 23\text{u}$
- Durchschnittliche Atommasse: Elemente kommen als Isotopengemisch vor; die Häufigkeit wird bei der Berechnung berücksichtigt → relative Atommasse (A_r), keine Einheit

Massendefekt:

Die Masse eines Atoms entspricht nicht genau der Summe der Massen der Teilchen, sondern ist geringer. Masse kann in Energie umgewandelt werden ($E = mc^2$). Je höher der Massendefekt, desto stabiler ist der Atomkern. Höchster Massendefekt bei Fe.

Stoffmenge n

- Stoffmenge n = Anzahl Moleküle in einer Stoffportion (Einheit: mol)
- $1 \text{ mol} = 6,022 \cdot 10^{23}$ Teilchen
- Avogadro-Zahl: $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ (per Definition Anzahl Atome in $12,000\text{g } {}^{12}_6\text{C}$)
- Formel: $n = \frac{m}{M}$ (mit m = Masse Stoffportion, M = Molare Masse → siehe PSE)

4.) Elektronenhülle

Bohrsches Atommodell Elektronen im Atom auf unterschiedlichen Energieniveaus (veraltet):

Schale	Hauptquantenzahl n	Maximale Elektronenzahl
K	1	2
L	2	8
M	3	18
N	4	32

Quantenmechanik (Wellenmechanisches Atommodell)

- Elektronen haben Wellen- und Teilchencharakter
- Elektronen liegen auf diskreten Quantenmechanik-Energieniveaus
- Orbitale = Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen (zu 90%)

Klassifizierung der Orbitale

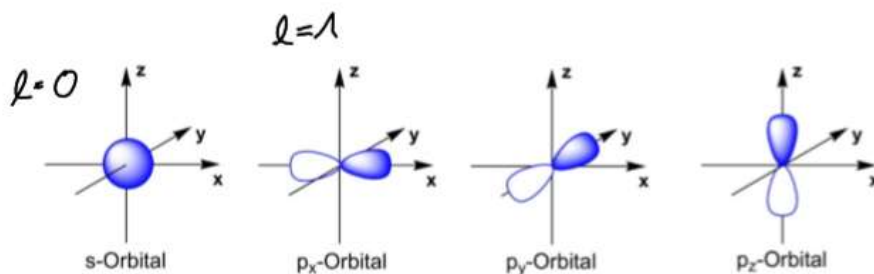
Orbitale werden durch vier Quantenzahlen n , l , m , s definiert:

- 1) Hauptquantenzahl n (Hauptenergieniveau, Schale); je größer n , desto größer ist die Energie des Elektrons; max. Zahl Elektronen: $2n^2$ $n = 1, 2, 3, \dots$
- 2) Nebenquantenzahl l (räumliche Gestalt des Orbitals, Bahndrehimpuls); Buchstaben für sharp, principal, diffuse, fundamental $l = 0, 1, \dots, (n-1)$ / s, p, d, f-Orbitale
- 3) Magnetquantenzahl m : Orientierung des Orbitals im Raum (räumliche Ausrichtung), wenn von außen ein Magnetfeld angelegt wird $m = -l, -(l-1), \dots, (l-1), l$
- 4) Spinquantenzahl (Spin des Elektrons), wird benötigt, um Elektron vollständig zu beschreiben $s = +0,5 / -0,5$

n	Mögliche Werte für l	Bezeichnung der Unterschale	Mögliche Werte von m	Anzahl Orbitale in Unterschale	Gesamtzahl Orbitale in Schale
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	1, 0, -1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	1, 0, -1	3	
	2	3d	2, 1, 0, -1, -2	5	
4	0	4s	0	1	18
	1	4p	1, 0, -1	3	
	2	4d	2, 1, 0, -1, -2	5	
	3	4f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	9	

- n , l , m identifizieren Orbital; in jedem Orbital können sich zwei Elektronen aufhalten
- n , l , m , s identifizieren Elektron
- zwei Elektronen in einem Orbital bezeichnet man als gepaarte Elektronen (entgegengesetzte Spins heben sich in magnetischen Eigenschaften auf)
- Pauli-Prinzip: alle e^- in einem Atom müssen sich unterscheiden, dürfen nicht in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen

Aussehen der Orbitale:



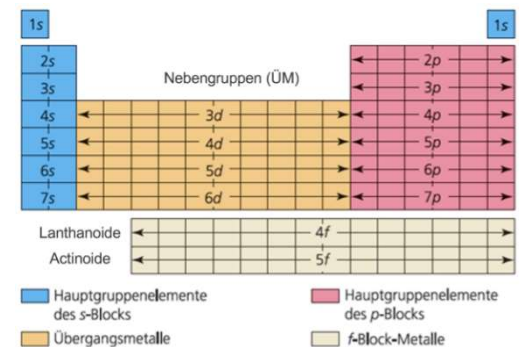
Orbitalbesetzung:

- Zunächst werden Atomorbitale mit niedrigster Energie besetzt (Natur bevorzugt Zustand geringer Energie)
- Orbitale gleicher Nebenquantenzahl haben das gleiche Energieniveau

- Hund'sche Regel: energiegleiche (entartete) Orbitale werden zunächst einfach besetzt (maximale Anzahl ungepaarter Elektronen)
- Besetzungsschema der Orbitale wird auch als Elektronenkonfiguration bezeichnet
- Beispiel Schreibweise:
 - ${}^2\text{He}: 1s^2$
 - ${}^{17}\text{Cl}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ alternativ: $[\text{Ne}] 2s^2 2p^1$

5.) Periodensystem

- Elemente zeigen periodisch wiederkehrende Eigenschaften (Spalten im PSE)
- Chemische Eigenschaften sind von Anzahl Valenzelektronen abhängig
- Periodensystem:
 - **Perioden** (Zeilen) → gleiche Hauptquantenzahl n
 - Haupt- und Nebengruppen (Spalten)
- Elemente mit s- und p-Orbital in Valenzschale: Hauptgruppe; zusätzlich d-Orbitale: Nebengruppe
- Benennung der Hauptgruppen: 1 Alkalimetalle, 2 Erdalkalimetalle, 6 Chalkogene, 7 Halogene, 8 Edelgase



Trends im Periodensystem

- Atomradius:
 - nimmt innerhalb einer Gruppe zu (mit Periode)
 - nimmt innerhalb einer Periode ab (mit Gruppe), aufgrund erhöhter Kernladungszahl
- Ionisierungsenergie: Energie, um ein Elektron aus dem Atom zu entfernen
 - Nimmt innerhalb einer Periode zu
 - Nimmt innerhalb einer Gruppe ab
 1. Ionisierungsenergie: $A \rightarrow A^+ + e^-$
 2. Ionisierungsenergie: $A^+ \rightarrow A^{2+} + e^-$
- Elektronegativität: empirisches Maß für Fähigkeit eines Atoms Bindungselektronen an sich zu ziehen (Pauli-EN)
 - Nimmt innerhalb einer Periode zu (ohne Edelgase)
 - Nimmt innerhalb einer Gruppe ab

2. Die chemische Bindung

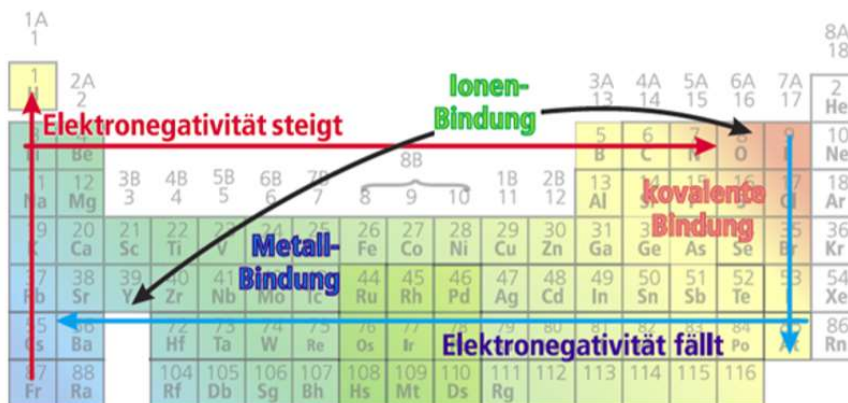
1.) Oktettregel und Bindungsarten

Oktettregel:

- Alle Atome sind bestrebt formal acht Außenelektronen zu besitzen (außer Edelgase, Wasserstoff 2), da die Edelgaskonfiguration besonders stabil ist
- Dies wird durch eine chemische Bindung mit anderen Atomen erreicht
- Gilt für Elemente der 1. und 2. Periode

Moleküle:

- Bestehen aus min. 2 Atomen, die durch eine chem. Bindung verknüpft sind
- Alle Elemente (außer Edelgase) kommen in der Natur nicht atomar, sondern als Moleküle vor
- Einteilung in
 - Ionische und metallische Bindung → Aufnahme / Abgabe von Elektronen
 - Kovalente Bindung → Atome teilen sich Elektronen
- Art der Bindung ist vom Elektronegativitätsunterschied ΔEN abhängig



2.) Ionische Bindung

- Ionen bestehen oft aus Metall + Nichtmetall → hohe EN-Differenz, ein Element stellt einem anderen seine Valenzelektronen vollständig zur Verfügung
- $\Delta EN \approx 1,7$
- Bilden im festen Zustand ein Kristallgitter (Salz)

Eigenschaften von Salzen:

- Hoher Schmelz- und Siedepunkt (Stabile Kristallstruktur)
- Nichtleitend als Kristall (fest), leitend in der Schmelze
- Hart, spröde → bei seitlicher Verschiebung der Kristallebenen kommt es zur Abstoßung zwischen den Ionen
- Sind gut wasserlöslich, da H_2O polar ist und sowohl Kationen als auch Anionen hydratisiert

Nomenklatur:

Kationen:

- Metalle: Element + ion (eventuell mit Ladungsangabe, z.B. Eisen-(II)-ion)
- Nichtmetalle: Stammverbindung + iumion (z.B. Ammoniumion)

Anionen

- Einatomige und einfache zweiatomige Anionen: -id (z.B. OH Hydroxid, S^{2-} Sulfid, Chlorid)
- Mehratomige Anionen der Sauerstoffsäuren: -it oder -at (mit -it sauerstoffärmer; -at sauerstoffreicher; z.B. SO_3^{2-} Sulfit und SO_4^{2-} Sulfat)
- Mehr als zwei Oxianionen: Präfixe Hypo- (weniger Sauerstoff) und Per- (mehr Sauerstoff); z.B. Hypochlorit ClO^- , Chlorit ClO_2^- , Chlorat ClO_3^- , Perchlorat ClO_4^-
- Zufügen von Wasserstoff: Hydrogen-, Dihydrogen- (Hydrogenphosphat HPO_4^{2-})
- Wichtige Salze:

Summenformel	Name / Trivialname	Summenformel	Name / Trivialname
NaCl	Natriumchlorid / Kochsalz	NaF	Natriumfluorid
KI	Kaliumiodid	FeSO ₄	Eisen-(III)-Sulfat
NaHCO ₃	Natriumhydrogencarbonat	KClO ₄	Kaliumperchlorat
Na ₂ CO ₃	Natriumcarbonat	KOCl	Kaliumhypochlorid
NaHSO ₃	Natriumhydrogensulfid	KMnO ₄	Kaliumpermanganat
NaHS	Natriumhydrogensulfid	Li ₂ CO ₃	Lithiumcarbonat
MgSO ₄	Magnesiumsulfat	LiNO ₂	Lithiumnitrit
MgCO ₃	Magnesiumcarbonat	LiNO ₃	Lithiumnitrat
Na ₂ SO ₄	Natriumsulfat	NaNO ₂	Natriumnitrit
BaSO ₄	Bariumsulfat	Na ₂ S ₂ O ₃	Natriumthiosulfat
CaSO ₄	Calciumsulfat	ZnO	Zinkoxid
AgNO ₃	Silbernitrat		
CaCO ₃	Calciumcarbonat		

3.) Metallische Bindung

- Elektronen des Metalls sind beweglich (Elektronengas)
- Metallgitter aus positiven Metallionen (Atomrümpfe), verschiedene Gittertypen (3D-Anordnung; z.B. kubisch, hexagonal))
- Kationen teilen sich Elektronen

Eigenschaften Metalle:

- Hohe Leitfähigkeit, hohe Wärmeleitfähigkeit
- Hohe Duktilität (Verformbarkeit), nicht spröde
- Metallischer Glanz

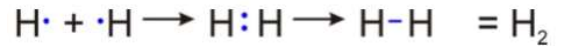
Einteilung der Metalle

- Dichte: Leichtmetalle ($\rho < 4,5 \frac{g}{cm^3}$), Schwermetalle ($\rho > 4,5 \frac{g}{cm^3}$)
- Schmelztemperatur: niedrig (unter 600°), mittel (600-1100°), hoch (über 1100°) schmelzende Metalle
- Oxidierbarkeit: unedle Metalle (Natrium, Magnesium), edle Metalle (Silber, Gold, Platin)

Metalle: eine Atomsorte, Legierungen: homogenes Gemisch mehrerer Metalle

4.) Kovalente Bindung

- Auch Atombindung, Elektronenpaarbindung
- Valenzelektronen bilden gemeinsam Elektronenpaare (teilen sich die Elektronen)
- Gerichtete Bindung
- Einfachbindung oder Mehrfachbindung (z.B. Doppelbindung bei Sauerstoff)
- unpolare Bindung (kaum EN-Unterschied, <0,4), gleichmäßige Verteilung der Elektronen, z.B.: H₂, Bindungen aus zwei identischen Atomen
- polare Atombindung → Ladungsschwerpunkt

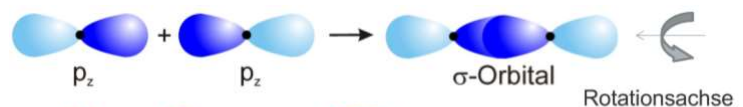


Molekülorbital-Theorie:

- Beschreibt die Bindungsverhältnisse in Molekülen
- Molekülorbitale (MO) = Linearkombinationen von Atomorbitalen (AO)
- Delokalisierung von Atomorbitalen, gemeinsame Schalen
- Antibindendes MO: Subtraktion der beiden MO (keine Überlagerung)

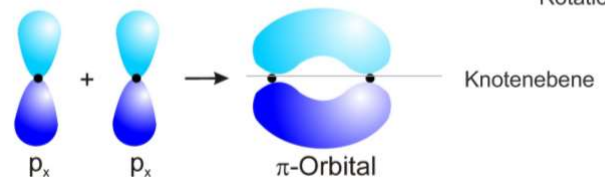
σ -Orbital:

- Rotationsachse bezüglich der Bindungsachse
- Beim H-Atom: durch Überlappung der zwei s-Orbitale entsteht das σ -Orbital (bindendes MO)
- Hauptbindung; ist bei Molekülen immer vorhanden



π -Orbital:

- Ebene Knotenfläche, entlang der Bindungsachse
- Weniger starke Bindung
- Überlagerung von senkrecht zur Bindungsachse stehenden p-Orbitalen
- Bei Doppel- und Dreifachbindungen (z.B. Stickstoff: ein σ -Orbital, zwei π -Orbitale)



Lewis-Schreibweise:

Darstellung der Valenzelektronen durch Striche (zwei Elektronen) und Punkte (ein Elektron); Ziel ist immer eine Edelgaskonfiguration (8 Elektronen)

- Vereinfachte Darstellung: es wird nicht zwischen Orbitalen unterschieden
- Innere Schalen werden nicht dargestellt
- Begrenzte Darstellung: O₂ ist in Wirklichkeit ein Diradikal und hat keine Doppelbindung

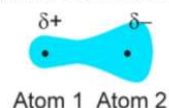


Polare Atombindung:

Aufgrund einer großen Elektronegativitätsdifferenz zwischen den Bindungspartnern, kommt es zu einer unsymmetrischen Ladungsverteilung des bindenden Elektronenpaars → partiell positive und negative Ladung

- Größte Differenz bei HF (bei allen Halogensäuren stark)

polarisierte kovalente Bindung



EN Atom 1 < Atom 2

Bindungsdissoziationsenergie (BDE): benötigte Energie, um eine Bindung aufzulösen

VSEPR-Theorie: 3D – Struktur eines Moleküls

- Elektronenpaare stoßen sich ab, je nach Anzahl der Elektronenpaare ergeben sich die Strukturen linear (2), trigonal eben (3), tetraedisch (4) $109,5^\circ$
- Bei freien Elektronenpaaren sind die Winkel etwas anders, da diese mehr Platz in Anspruch nehmen (räumlich anspruchsvoller)

Molare Masse:

- Summe aus den molaren Massen der Elemente (mit Indexzahlen multiplizieren)
- Einheit: g/mol; Symbol: M
- Entnahme der Indexzahlen aus der Summenformel des Moleküls (Elemente höherer EN stehen rechts, ist auch im Namen so)
- Masse, die 1mol des Atoms / Moleküls hat

Edelgasregel: Atome streben eine stabile Edelgas-Elektronenkonfiguration an.

Oktettregel: Nichtmetalle der 2. Periode streben ein Elektronenoktett in der äußersten Schale an. Sie können daher maximal 4 Valenzelektronenpaare (8 Valenzelektronen) um sich gruppieren.

Bindigkeit: Die Anzahl der Atombindungen, die ein Atom eingehen kann. Für Nichtmetalle der 2. Periode gilt $b = (8 - N)$; N = Anzahl der Valenzelektronen bzw. Hauptgruppennummer des Elements.

Anzahl der Bindungselektronen = $2 \times (\text{Anzahl der H-Atome}) + 8 \times (\text{Anzahl sonstiger Atome}) - (\text{Gesamtzahl der Valenzelektronen})$

3. Zustandsformen, Phasengleichgewichte

1.) Aggregatzustände

Vergleich: Die chemische Bindung basiert auf intramolekularen Wechselwirkungen, die Aggregatzustände basieren auf intermolekularen Wechselwirkungen.

Aggregatzustände:

- Aggregatzustand eines Stoffes wird durch Verhältnis von kinetischer Energie E_{kin} (ungerichtete thermische Bewegung) und zwischenmolekularen Kräften E_{inter} entschieden
- Fest: $E_{\text{kin}} \ll E_{\text{inter}}$; Stoff behält Form und Volumen bei
- Flüssig: $E_{\text{kin}} \approx E_{\text{inter}}$; Stoff behält Volumen bei, Form passt sich an
- Gasförmig: $E_{\text{kin}} \gg E_{\text{inter}}$; hat weder bestimmtes Volumen noch Form, Stoff füllt den Raum aus

Gase:

- Ideales Gas (Modell für theoretische Betrachtung von Gasen): Gasteilchen sind Punkte ohne räumliche Ausdehnung, ohne Wechselwirkungen und ohne eigenes Volumen
 - Beschreibung: $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$ (mit p = Druck; n = Stoffmenge; T = Temperatur in K; V = Volumen; R = ideale Gaskonstante = 8,314 J/mol*K)
- Reale Gase: Wechselwirkungen und Eigenvolumen, vor allem bei niedrigen Temperaturen und hohen Drücken

Flüssigkeiten:

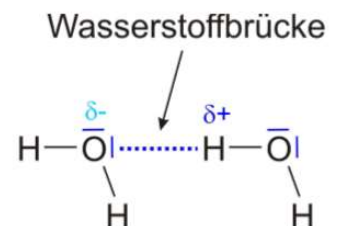
- Wechselwirkungen zwischen Teilchen, sie werden in einem bestimmten Volumen zusammengehalten
- Beweglich (mikro- und makroskopisch), weniger als bei Gasen
- Werden die Anziehungskräfte überwunden, verdampfen die Teilchen (Dampfphase); Abhängig von Stoff und Temperatur

Festkörper:

- Kristallin: regelmäßige Anordnung der Teilchen auf festen Positionen, z.B. im Ionengitter (Salze), Diamant, Schnee (Molekulkristalle)
- Amorph: keine geordnete 3D-Struktur, wie Flüssigkeit aufgebaut, jedoch ohne Bewegung

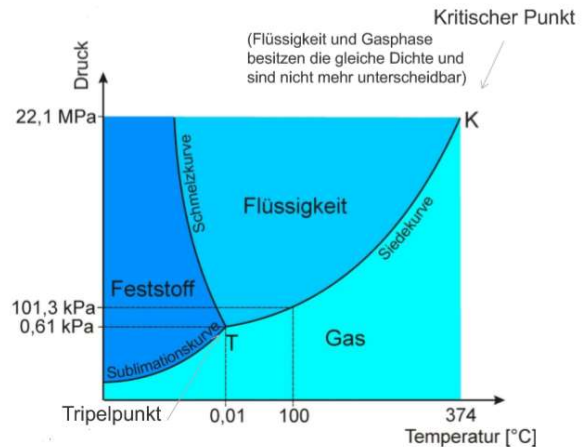
2.) Zwischenmolekulare Wechselwirkungen

- Elektrostatische Wechselwirkungen (Dipol-Dipol, Ionen-Dipol)
- Wasserstoffbrückenbindungen (spezielle Dipol-Dipol WW)
 - Besonders stabile Verbindung zwischen H und O, N, S oder F (stark elektronegativ)
 - Hat großen Einfluss auf physikalische Eigenschaften (z.B. Schmelzpunkt)
- Van-der-Waals-Wechselwirkungen (spontane, temporäre Dipole)
- Hydrophobe Wechselwirkungen



3.) Phasenumwandlungen

- Energie des Systems steigt von fest → flüssig → gasförmig
- Phasendiagramm: stellt Aggregatzustand in Abhängigkeit von Temperatur und Druck dar
 - Tripelpunkt: alle drei Phasen gleichzeitig in Gleichgewicht
 - Besonderheit bei Wasser: Schmelzkurve hat eine negative Steigung (Dichteanomalie des Wassers → Maximum bei 4°C)



Destillation (Verfahren zur Stofftrennung):

- Voraussetzung: Reinstoffe eines Stoffgemisches haben unterschiedliche Siedepunkte
- Temperatur zwischen Siedepunkten, ein Stoff verdampft, einer bleibt flüssig
- flüchtigerer Stoff reichert sich im Destillat an
- Vakuumdestillation: Destillation unter vermindertem Druck

Sublimation (Verfahren zur Stofftrennung): Phasenübergang fest-gasförmig, im Vakuum

- Gefriertrocknung:
 - Sublimation von Wasser (Eis); Lyophilisieren
 - Verdampfungsenthalpie hält Wasser in der festen Phase
 - schwerflüchtige Substanzen bleiben als Pulver im Kolben zurück
 - schonende Methode zur Trocknung thermolabiler Verbindungen

4.) Gemische und Phasengleichgewichte

Gemisch: Substanz aus wenigstens zwei Reinstoffen

Homogene Gemische:

- Vermischung auf molekularer Ebene → eine einzige Phase
- Erscheint optisch wie ein Reinstoff
- Beispiele: Gas: Luft (N₂, O₂, Ar, CO₂); Feststoff: Legierung; Flüssigkeit: Lösung (besteht aus einem oder mehreren gelösten Stoffen, die molekular-dispers in einem Lösungsmittel verteilt sind)
- Konzentration: $c = \frac{n}{V}$ mit c = Konzentration des Stoffes (in mol/l bzw. mol/dm³), n = Stoffmenge des Stoffes; V = Volumen der Lösung (nicht des Lösungsmittels)

Heterogene Gemische:

- Dispersionen: Stoffe bilden jeweils eine eigene Phase

Kontinuierliche Phase	Dispergierte Phase	Bezeichnung	Beispiel
Gas	Flüssigkeit	Aerosol	Wolken, Nebel, Haarspray
	Feststoff	Aerosol	Rauch
Flüssigkeit	Gas	Schaum	Schlagsahne, Bierschaum
	Flüssigkeit	Emulsion	Kosmetika, Mayonnaise
	Feststoff	Sol	Tinte, Dispersionsfarbe
Feststoff	Gas	poröse Materialien, Schaum	Styropor, Soufflé
	Flüssigkeit	feste Emulsion	Butter
	Feststoff	feste Suspension	Zement

⊗ nicht homogen

- Grenzfall: kolloidale Lösungen (dispergierte Teilchen 3-200 nm); fließende Grenze zwischen homogen und heterogen

Verhalten von Stoffen in Mehrphasengemischen:

- Verteilungsgleichgewicht (wichtig bei Reinigung und Trennung von Stoffgemischen)
- Dynamische Gleichgewichte (makroskopischer Zustand bleibt); die Prozesse kompensieren sich in der Summe
- Gleichgewichtskonstante K:

$$K(T) = \frac{c(\text{Phase 1})}{c(\text{Phase 2})} = \text{konstant}$$

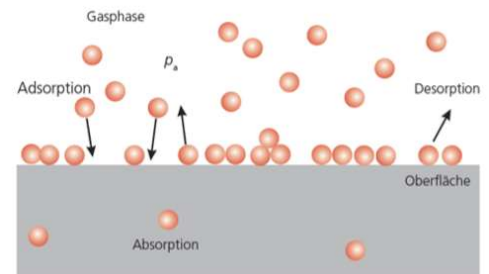
Löslichkeit von Gasen in Flüssigkeiten (Henry-Dalton-Gesetz)

$$K = \frac{\text{Partialdruck des Gases } p(A)}{\text{Konzentration in Flüssig } c(A)} \rightarrow \text{Verhältnis muss erhalten bleiben}$$

- Taucherkrankheit (erhöhte Löslichkeit von N₂ im Blut), bei zu schnellem Auftauchen kommt es zur Bläschenbildung in Gefäßen und Gefäßschäden und Embolien

Adsorption an Oberflächen:

- Adsorption: Auf der Oberfläche (Wechselwirkung eines Stoffes mit fester Oberfläche); vgl. Absorption: Im Phaseninneren
- Abhängig von Konzentration, Partialdruck von Stoff A; Wechselwirkung mit Oberfläche; Oberfläche des Adsorptionsmittels
- Anwendung: Stofftrennung (Chromatographie: Lösungsmittel durch Kieselgel mit unterschiedlichen Fraktionen, Geschwindigkeit der Fraktionen abhängig von Wechselwirkung mit Kieselgel; als feste Phase ist auch Zellulose (Filterpapier) möglich)



Lösung von Salzen:

- Salze dissoziieren in Wasser zu hydratisierten Ionen
- Löslich aufgrund von Ionen-Dipol-Wechselwirkung

- Solvation: Umhüllung eines Moleküls oder Ions durch Lösungsmittelmoleküle
- Hydratisierungsenergie (Hydratationsenergie ΔH_{Hyd}) $\leftrightarrow$ Gitterenergie (Kristall) ΔH_{Gitter}
 - Je größer die Ladung und je kleiner der Radius der Ionen sind, desto höher ist die Gitterenergie
 - Je größer die Ladung und je kleiner der Radius der Ionen ist, desto größer ist die Hydratationsenergie
- Löslichkeitsprodukt: Konstante, gibt maximale Löslichkeit eines Salzes in einer Lösung an
 - $L_p = [A]^m \times [B]^n$ mit A und B Ionen des Salzes (z.B. BaSO_4)

Diffusion entlang eines Konzentrationsgradienten:

- Passive Diffusion, Moleküle wandern von hoher zu niedriger Konzentration
- Gleichverteilung wird angestrebt
- Zur Ausbildung von Konzentrationsgradienten sind Energie und semipermeable Membranen notwendig
- Dialyse: Diffusion durch semipermeable Membran; Blutreinigung: Trennung von Blutkomponenten und unerwünschten Stoffwechselprodukten (z.B. Harnstoff)
- Osmose:
 - Membran ausschließlich für Lösungsmittel durchlässig
 - Lösungsmittelmoleküle wandern von reiner Phase zu konzentrierter Lösung
 - GG aus Konzentrationsgradient und hydrostatischem Druck $\rightarrow$ osmotischer Druck

4. Chemische Reaktionen und Kinetik, Thermodynamik

1.) Reaktionsgleichungen

Chemische Reaktion = Stoffumwandlung: $aA + bB \rightarrow cC + dD$ (Edukte $\rightarrow$ Produkte)

- a, b, c, d sind stöchiometrische Faktoren (ganze Zahlen) und müssen ausgeglichen werden
 - bestimmen Anzahl beteiligter Moleküle, Stoffmenge n in mol
 - Masse m in g kann stöchiometrisch berechnet werden ($n=m/M$)
- bei chemischen Reaktionen bleiben Zahl der Atome, Masse und Ladung erhalten (Erhaltungsgrößen)

Aufstellen von Reaktionsgleichungen:

- 1) Alle Edukte und Produkte aufschreiben
- 2) Massen- und Ladungsbilanz aufstellen und ausgleichen
- 3) Formel auf ganzzahlige Werte erweitern

2.) Thermodynamik

$\rightarrow$ Energetische Betrachtung chemischer Reaktionen

$\rightarrow$ beschreibt Änderung der Energiezustände der Moleküle während der Reaktion

1. Hauptsatz der Thermodynamik: Energie kann weder erschaffen noch vernichtet werden

- Energie tritt z.B. in Form von chemischen Bindungen (chemische Energie), Thermischer Energie (Wärme), Elektromagnetischer Strahlung, elektrischer Energie oder mechanischer Energie in Erscheinung
- Einheit: Joule; $1J = 1Nm = 1Ws$

Systeme:

- Offen: Energie- und Stoffaustausch mit Umgebung
- Geschlossen: Energieaustausch mit Umgebung, kein Stoffaustausch
- Abgeschlossen: kein Energie-, kein Stoffaustausch mit Umgebung

Innere Energie U:

$\rightarrow$ Summe aller kinetischen und potentiellen Energiewerte sämtlicher Bestandteile des Systems

- Z.B. Verbindungen: Energie der Bewegung der Teilchen, Rotationen, Vibrationen, Kernenergie, Elektronen
- Keine absoluten Werte, nur Differenzen (Veränderung des Energiezustandes vor und nach der Reaktion); ΔU
- $\Delta U = Q + W$ (Q: Wärme, W: Arbeit)
- Es wird ein möglichst geringer Energiezustand angestrebt

Enthalpie ΔH :

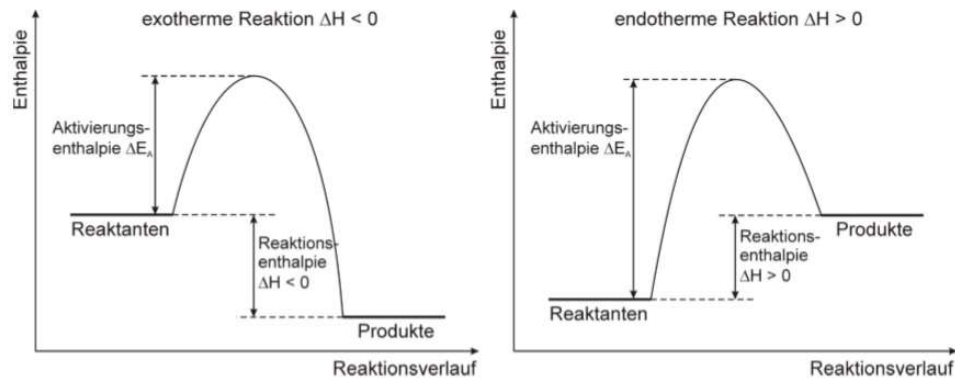
$\rightarrow$ Wärme bei konstantem Druck

- Reaktionsenthalpie: $\Delta H = H_{\text{Produkte}} - H_{\text{Edukte}}$

- Bindungsdissoziationsenergie (BDH): Energie der Homolyse (Energie der Bindung)
- $\Delta_R H = \sum BDE(\text{Edukte}) - \sum BDE(\text{Produkte})$; Achtung: Anzahl der Bindungen müssen mit einberechnet werden (z.B. H_2O : $2 \cdot \text{O-H}$)

exotherm und endotherm:

- exotherm: $\Delta H < 0$; Während der Reaktion wird Energie frei
- endotherm: $\Delta H > 0$; Während der Reaktion wird Energie aufgenommen



Entropie S:

- Maß für die Unordnung eines Zustands
- Grund für das freiwillige Ablaufen von endothermen Prozessen; neben Enthalpie zweite Triebkraft einer Reaktion
 - $\Delta S > 0$: Unordnung nimmt zu
 - $\Delta S < 0$: Unordnung nimmt ab
- Es wird eine möglichst große Unordnung angestrebt

2. Hauptsatz der Thermodynamik: Bei einem Prozess in einem abgeschlossenen System muss sich die Reaktionsentropie erhöhen oder konstant bleiben

- $\Delta S = 0$ reversibel
 - $\Delta S > 0$ irreversibel
- dies gilt nur für abgeschlossene Systeme!

Gibbs-Helmholtz-Gleichung

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \quad \text{mit } T: \text{Temperatur in K}$$

- $\Delta G < 0$: Exergon (freiwillig)
- $\Delta G > 0$: Endergon (nie freiwillig)

ΔH	ΔS	ΔG	Prozess ist
< 0	> 0	< 0	immer freiwillig
> 0	< 0	> 0	nie freiwillig
< 0	< 0	> 0	bei hoher Temperatur nicht freiwillig
		< 0	bei niedriger Temperatur freiwillig, wenn $T < \Delta H / \Delta S$
> 0	> 0	> 0	bei niedriger Temperatur nicht freiwillig
		< 0	bei hoher Temperatur freiwillig, wenn $T > \Delta H / \Delta S$

Standardbildungsenthalpie $\Delta_f H^0$:

Reaktionsenthalpie bei der Bildung von 1mol einer chemischen Verbindung aus den Elementen (in ihrer stabilsten Modifikation, d.h. O_2 nicht O) unter Standardbedingungen

- $\Delta_f H^0$ von Elementen ist Definitionsgemäß null
- $\Delta_R H = \Delta_f H(\text{Produkte}) - \Delta_f H(\text{Edukte})$

3.) Kinetik

→ beschreibt Geschwindigkeit, mit der sich die Konzentration der Edukte und Produkte ändert: mit welchem Tempo das Gleichgewicht erreicht wird

- Reaktionsgeschwindigkeit: Änderung der Konzentration der Substanz pro Zeiteinheit
 - Beeinflusst durch: Aggregatzustand, Konzentration, Temperatur, Katalysator

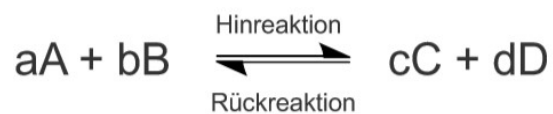
$$v = \frac{dc(A)}{dt}$$

- Aktivierungsenergie: Energie, die aufgebracht werden muss, damit eine chemische Reaktion abläuft

4.) Chemisches Gleichgewicht

Gleichgewichtskonstante K:

$$K = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$



$$\Delta G = -T \cdot R \cdot \ln(K)$$

- Anwendung z.B. bei der Synthese von Stickstoff (Haber-Bosch-Verfahren)

Prinzip von Le Chatelier:

Wird ein chemisches Gleichgewicht gestört, verschiebt sich das Gleichgewicht entgegen dieser Störung

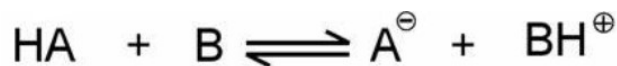
- Störungen sind Änderung von
 - Temperatur: Temperaturerhöhung führt zur Verschiebung des GG nach rechts (endotherm) oder nach links (exotherm)
 - Druck: bei Änderung der Anzahl der Gasteilchen relevant, Druckerhöhung → GG auf Seite der niedrigeren Teilchenanzahl
 - Konzentration:

A + B $\rightleftharpoons$ C + D	Veränderung der Gleichgewichtslage
Zugabe von A oder B	Verschiebung nach rechts
Entfernung von A oder B	Verschiebung nach links
Zugabe von C oder D	Verschiebung nach links
Entfernung von C oder D	Verschiebung nach rechts

5.) Säuren und Basen

1.) Säure-Base-Definition (nach Brønsted)

- Bei der Reaktion werden Protonen (H^+) übertragen, hierbei gibt die Säure ein Proton ab (Donor / Protonendonator) und die Base nimmt ein Proton auf (Akzeptor / Protonenakzeptor)
 - Säure: besitzt ein polar gebundenes H-Atom, saure Lösungen enthalten vor allem H_3O^+ -Ionen
 - Base: besitzt min. ein freies Elektronenpaar, alkalische Lösungen enthalten OH^- -Ionen
 - Heterolytische Bindungsspaltung
- Säure-Base-Reaktionen sind GG-Reaktionen



- Unter konjugierten Paaren (korrespondierend) versteht man Teilchen, die sich nur durch ein Proton unterscheiden: z.B.: H_2O und H_3O^+
- Ampholyt (amphoteres Teilchen): Teilchen, welches sowohl als Säure als auch als Base reagieren kann (H_2O , NH_3); die Funktion richtet sich nach der Art des Reaktionspartners
- Neutralisationsreaktion: $H_3O^+ + OH^- \rightarrow 2 H_2O$

2.) pH-Wert

- Ionenprodukt des Wassers: $K_W = c(H_3O^+) c(OH^-) = 10^{-14} \text{ mol}^2/\text{l}^2$
- Der pH-Wert lässt sich aus der Konzentration der H_3O^+ -Ionen bestimmen:

$$pH = -\log[H_3O^+] \quad pOH = -\log[OH^-]$$

$$pH + pOH = 14$$

- $pH < 7$: sauer; $pH = 7$: neutral; $pH > 7$: alkalisch, basisch

3.) Stärke von Säuren und Basen

- Unterscheidung von starken und schwachen Säuren / Basen
- Säurekonstante: $K_S = \frac{[A^-] \cdot [H_3O^+]}{[HA]}$ $pK_S = -\log K_S$
 - Starke Säure: $pK_S < 0$
 - Schwache Säure: $pK_S > 0$
- Basenkonstante: $K_B = \frac{[BH^+] [OH^-]}{[B]}$ $pK_B = -\log K_B$
- $pK_S + pK_B = 14 \rightarrow$ konjugierte Paare: starke Säure $\leftrightarrow$ schwache Base

Berechnung des pH-Werts:

- Bei starken Säuren protolysiert die Säure vollständig, daher gilt: $pH = -\log[HA]_0$
 - Die 0 bedeutet Anfangskonzentration
- Schwache Säuren: $pH = \frac{1}{2}(pK_S - \log[HA]_0)$
- Schwache Basen: $pOH = \frac{1}{2}(pK_B - \log[B]_0)$

Auswahl an Säuren und Basen:

Säure / konjugierte Base	Summenformel	pK _s	Anmerkung
Chlorwasserstoff / Chlorid	HCl / Cl ⁻	-6	Salzsäure
Salpetersäure / Nitrat	HNO ₃ / NO ₃ ⁻	-1,3	
Essigsäure / Acetat	H ₃ C-CO ₂ H / H ₃ C-CO ₂ ⁻	4,8	ähnlich Ameisensäure / Formiat
Ammoniumion / Ammoniak	NH ₄ ⁺ / NH ₃	9,3	
Kohlensäure / Hydrogencarbonat	(CO ₂ + H ₂ O) / HCO ₃ ⁻	6,3	2-protonige Säure
Phosphorsäure / Dihydrogencarbonat	H ₃ PO ₄ / H ₂ PO ₄ ⁻	2,1	Kann noch weiter zweimal als Säure reagieren

4.) Titration

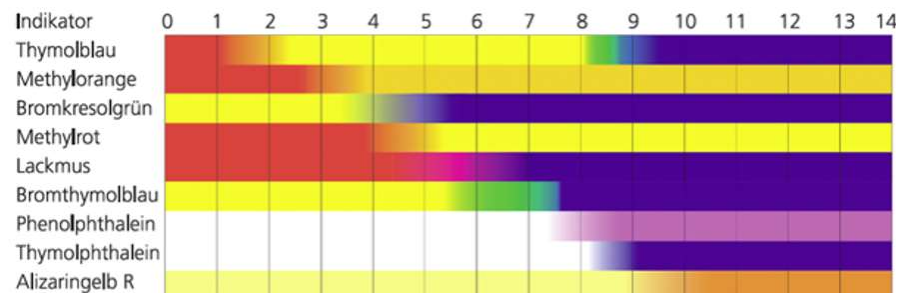
Ziel Säure-Base Titration: den pH-Wert einer Lösung zu bestimmen

Aufbau:

- Bürette mit Anfangsvolumen von z.B. NaOH (Konzentration bekannt), darunter Becherglas mit Probelösung (bekanntes Volumen) und Indikator
- Da sich Säure und Base neutralisieren tritt am Äquivalenzpunkt ($n(\text{OH}^-) = n(\text{H}_3\text{O}^+)$) der Umschlag des Indikators auf
- Aus dem Verbrauchten Volumen von NaOH lässt sich die Konzentration der Probelösung berechnen

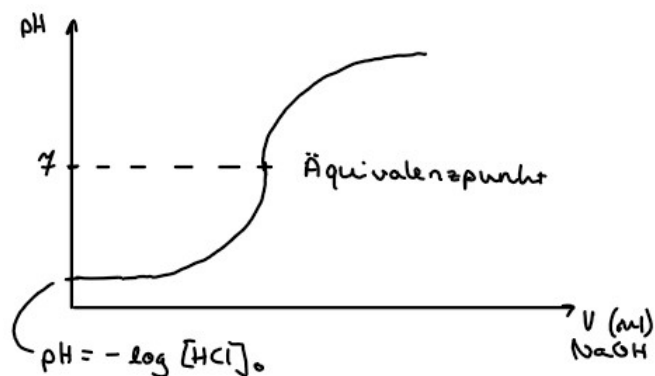
Indikatoren:

- Haben je nach pH-Wert eine bestimmte Farbe, welche am Umschlagspunkt (Indikatorspezifisch) geändert wird



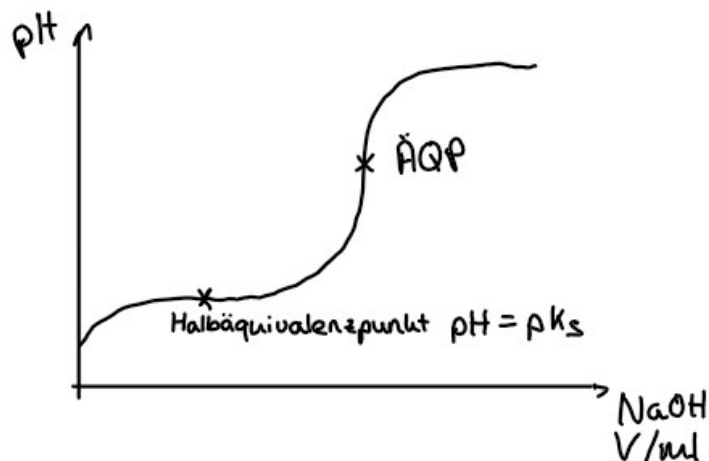
Titrationsskurven:

- Starke Säure: (hier HCl mit NaOH)

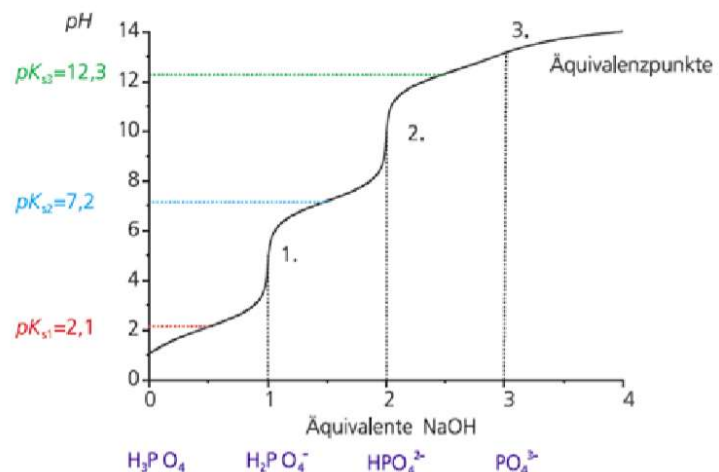


- Am Äquivalenzpunkt liegt genau dieselbe Stoffmenge NaOH wie HCl vor

- Schwache Säure: (hier Essigsäure mit NaOH)



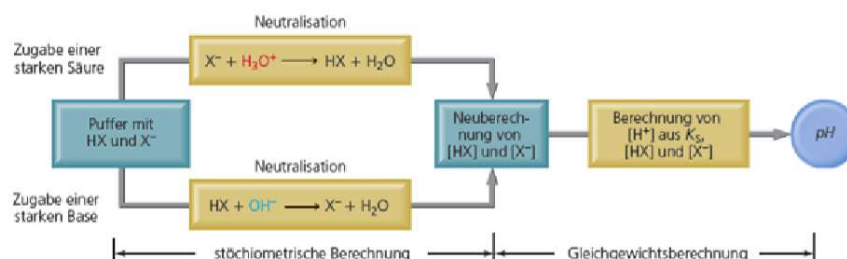
- Der Äquivalenzpunkt liegt nicht bei pH=7
 - Beim Bereich um den Halbäquivalenzpunkt handelt es sich um ein Puffergemisch
 - Bei sehr schwachen Säuren ist es schwierig den Äquivalenzpunkt zu bestimmen, da die Anfangs-pH-Werte vergleichsweise hoch sind
- Mehrprotonige Säuren
 - Besitzen mehrere Äquivalenzpunkte, da sie mehrfach ein Proton abgeben können



5.) Puffer

Bestehen aus einer schwachen Säure und ihrem Salz oder einer schwachen Base und ihrem Salz

- Puffer sorgen dafür, dass der pH-Wert in einem bestimmten Bereich konstant gehalten wird
- Henderson-Hasselbalch-Gleichung: $pH = pK_S + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$
 - Verhältnis von Säure und konjugierender Base spielt eine Rolle
- Funktionsweise der Puffer: Neutralisation
 - H_3O^+ -Ionen werden durch die Base abgefangen, OH^- -Ionen durch die Säure



6.) Redoxreaktionen

1.) Definition, Konzept

- Bei der Reaktion werden Elektronen übertragen (vgl. Säure-Base: Protonen)
- Oxidation: Abgabe von Elektronen, Erhöhung OZ
- Reduktion: Aufnahme von Elektronen, Erniedrigung OZ
- Oxidationsmittel: Substanz, die reduziert wird; nimmt Elektronen auf
- Reduktionsmittel: Substanz, die oxidiert wird; gibt Elektronen ab

Oxidationszahl OZ	Formale Hilfsgröße bei Redoxvorgängen, Zerlegung eines Moleküls durch Heterolyse aller Bindungen in einatomige Ionen; OZ = Ladung dieser hypothetischen einatomigen Ionen
Oxidierter Form (Ox)	Oxidationsmittel, Elektronenakzeptor
Reduzierter Form (Red)	Reduktionsmittel, Elektronendonator
Korrespondierendes Redoxpaar	$\text{Ox} + z e^- \rightleftharpoons \text{Red}$
Redoxreaktion	Elektronenübertragung von einem Redoxpaar zum anderen

Vergleich Säure-Base- und Redoxreaktionen:

	Säure/Base	Redox
Übertragenes Teilchen	Proton	Elektron
Donor	Säure	Reduktionsmittel
Akzeptor	Base	Oxidationsmittel
Angabe der Stärke	Relativ zu den Säure-Base-Eigenschaften des Wassers	Relativ zu den Redoxeigenschaften von Wasserstoff
Donor-/Akzeptorstärke eines Stoffes (unter Standardbedingungen)	pK_s/pK_b	E°
Donor-/Akzeptorstärke einer tatsächlichen Lösung	pH	E
Berechnung der Konzentrationsabhängigkeit der Donor-/Akzeptorstärke eines Stoffes	Henderson-Hasselbalch-Gleichung $pH = pK_s + \lg \frac{[\text{Base}]}{[\text{Säure}]}$	Nernstsche Gleichung $E = E^\circ + \frac{R \cdot T}{n \cdot F} \ln \frac{[\text{Ox}]}{[\text{Red}]}$

2.) Oxidationszahlen, Redoxgleichungen

Oxidationszahl (OZ) = Formaler Elektronenstatus eines Elements

- Kann fiktive oder tatsächliche Ladung sein
- Annahme, dass Elektronen einem Atom gehören
- Regeln:
 - Atome in elementarer Form OZ 0
 - Einatomige Ionen: OZ = Ladung

- Elektronen werden dem elektronegativeren Partner zugeteilt, bei gleichen Bindungspartnern, je die Hälfte der Bindungselektronen
- Fluor OZ -1
- Sauerstoff meist OZ -2, in Peroxiden OZ -1
- Wasserstoff meist OZ 1
- Halogene meist OZ -1
- Alkalimetalle OZ 1; Erdalkalimetalle OZ 2
- Gesamtzahl = 0; Bei Ionen Gesamtzahl = Ladung des Ions

Aufstellen von Redoxgleichungen

- OZ der Edukte und Produkte bestimmen und Teilgleichungen aufstellen
- Ladungs- und Massenausgleich mit H_2O , OH^- und H_3O^+
- Teilgleichungen multiplizieren, so dass Anzahl übertragener Elektronen ausgeglichen ist
- Teilgleichungen addieren, überflüssige Moleküle streichen
- Ergänzung fehlender Ionen und Probe

Begriffe:

- Disproportionierung: ein Element geht in eine höhere und niedrigere Oxidationsstufe über (z.B: H_2O_2 (OZ -1) zu O_2 (OZ 0) und H_2O (OZ -2))
- Komproportionierung: Gegenreaktion zur Disproportionierung; Element mit höherer und niedriger OZ reagiert zu Verbindung mit mittlerer OZ

3.) Elektrochemische Zelle

Galvanische Zelle

- Salzbrücke: Ionen- / Ladungsausgleich
- Hier: Daniell-Element
- Reaktionsgleichungen:
 - $\text{Zn} \rightarrow \text{Zn}^{2+} + e^-$ (Oxidation)
 - $\text{Cu}^{2+} + e^- \rightarrow \text{Cu}$ (Reduktion)
- Anode: Überschuss an Elektronen, Kathode: Mangel an Elektronen: Stromfluss

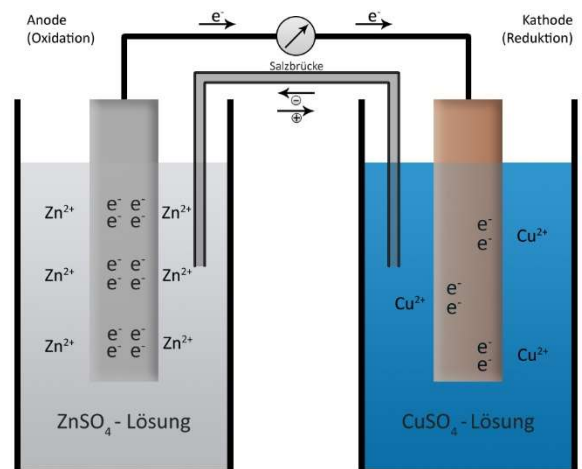
Anwendung: Stromerzeugung

Primärelemente (nicht wieder aufladbar)

- Liefern Strom bis enthaltene Stoffe aufgebraucht sind
- Vgl. Daniell-Element

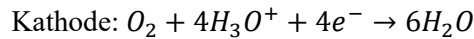
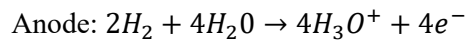
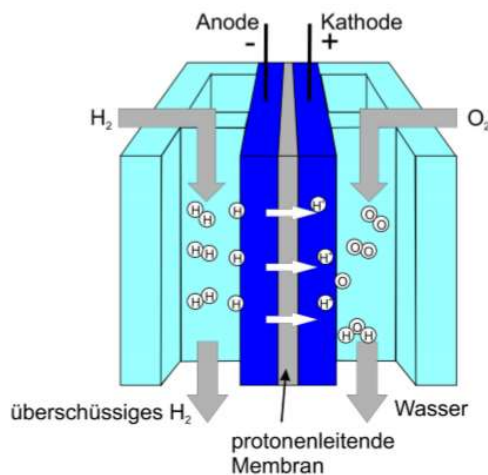
Sekundärelemente / Akkumulatoren (aufladbar)

- Können Auf- und Entladen werden
- Z.B. Autobatterie (Blei-Schwefelsäure-Zelle)
 - Anode: $\text{Pb} + \text{SO}_4^{2-} \rightarrow \text{PbSO}_4 + 2e^-$
 - Kathode: $\text{PbO}_2 + 4\text{H}^+ + \text{SO}_4^{2-} + 2e^- \rightarrow \text{PbSO}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$
- Lithium-Ionen-Akku
 - $\text{Li}_x\text{C}_m \rightarrow x\text{Li}^+ + \text{C}_m$
 - $\text{Li}^+ + \text{C}_a\text{O}_2 \rightarrow \text{LiC}_a\text{O}_2$



Brennstoffzellen

- Chemische Reaktionsenergie wird kontinuierlich über Brennstoff zugeführt, welcher in der Zelle über eine elektrochemische Reaktion in elektrische Energie umgewandelt wird



4.) Elektromotorische Kraft

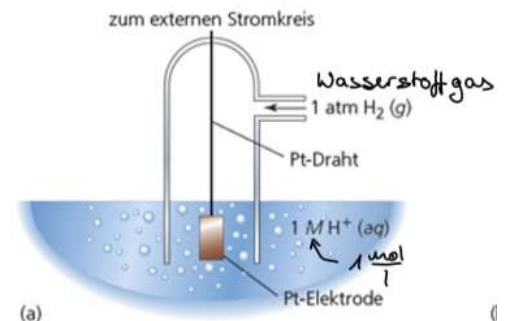
- $\Delta E = \text{EMK}$; für $\Delta E > 0$ läuft die Reaktion freiwillig ab
- Abhängig von Art des Redoxprozesses, Konzentration der redoxaktiven Teilchen, Temperatur
- $\Delta E^0 = E^0_{\text{Kathode}} - E^0_{\text{Anode}}$ mit E^0 = Standardhalbzellenpotential und ΔE^0 = Elektromotorische Kraft der Zelle
- $E^0(\text{Ox/Red})$ oxidierte / reduzierte Form

Standard-Wasserstoffelektrode (NHE)

- Referenzelektrode, Standardelektrode: Wasserstoff Potential 0
- Platinblech/gitter wird von Wasserstoffgas umspült
- $E^0(\text{H}^+/\text{H}_2) = 0,00\text{V}$

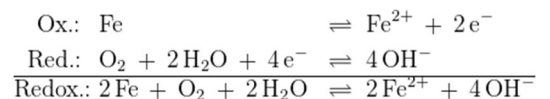
Spannungsreihe:

- Je unedler das Metall, desto negativer das Standardelektrodenpotential
- Unedle Metalle (negativ) reagieren gerne mit Säuren (lösen sich in Säuren unter Bildung von H_2), Oxidation läuft besser ab als Reduktion
- Stärkstes Oxidationsmittel: Fluor; stärkstes Reduktionsmittel: Lithium



Rost:

- Fe_2O_3
- Oxidation von Eisen und Reduktion von O_2
- Nicht rostendes Eisen: hoher Chromanteil; Bildung einer Chromoxidschicht (CrO_4)



5.) Nernst'sche Gleichung

- $\text{Ox}^{z+} + z \cdot \text{e} \leftrightarrow \text{Red}$
- Nernst'sche Gleichung: $E = E^0 + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln \frac{[\text{Ox}]}{[\text{Red}]}$

$$R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

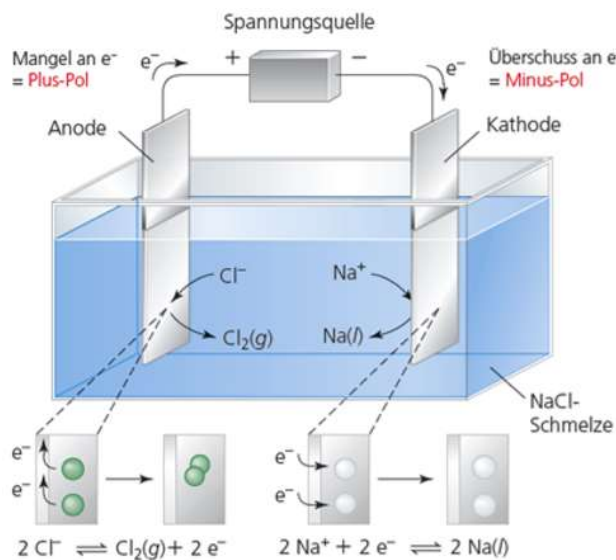
z = Anzahl Elektronen

$$F = N_a \cdot e = 96\,485 \frac{\text{C}}{\text{mol}}$$

- Faraday (25°C): $E = E^0 + \frac{0,057V}{z} \cdot \lg \frac{[Ox]}{[Red]}$
- Bei Metallen: $[M / M^{2+}]$: $E \approx E^0 + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln[M^{2+}]$

6.) Elektrolyse

- Umkehrreaktion der Redoxreaktion durch von außen angelegte Spannung; el. Energie ermöglicht nicht spontan ablaufende Reaktionen



- Anwendung: Herstellung von metallischen Schutzschichten auf korrosionsgefährdeten Metallen, elektrolytische Metallgewinnung aus wässriger Lösung / aus Salzschnmelzen, Chloralkali-Elektrolyse

7.) Organische Chemie: Allgemein

1.) Einführung in die organische Chemie

Organische Chemie: Chemie der Kohlenstoffverbindungen

- Sehr viele chemische Verbindungen besitzen ein Kohlenstoffgerüst, da Kohlenstoff mit anderen Elementen, z.B. Sauerstoff, Halogene, stabile kovalente Bindungen eingehen kann
- Darstellung in Valenzstrichformel oder Skelettformel (C- und H-Atome werden nicht dargestellt: 1 Strich stellt die Verbindung zwischen zwei C-Atomen dar)

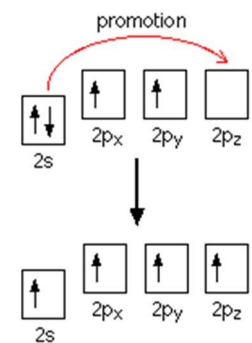
2.) Bindungsverhältnisse am Kohlenstoff

- Kohlenstoff bildet unter normalen Umständen 4 kovalente Bindungen aus
- Einfachstes organisches Molekül: Methan (CH_4); Tetraederwinkel: $109,5^\circ$

Hybridisierung:

Transformation der Atomorbitale am Beispiel Methan:

- Grundzustand: $2s^2 2p^2 \rightarrow$ ein p-Orbital ist nicht besetzt, das s-Orbital ist doppelt besetzt (man betrachtet immer nur die Valenzelektronen)
- Energetisch höherer Zustand: $2s^1 2p^3$ (keine Änderung der Gesamtenergie, liegt zwischen 2s und 2p)
- Die Kombination der Orbitale führt zu vier energetisch gleichen sp^3 -Hybridorbitalen (mit jeweils einem Elektron) $\rightarrow$ Valenzzustand: $(sp^3)^4$
- Die Hybridorbitale weisen in die Ecken des Tetraeders

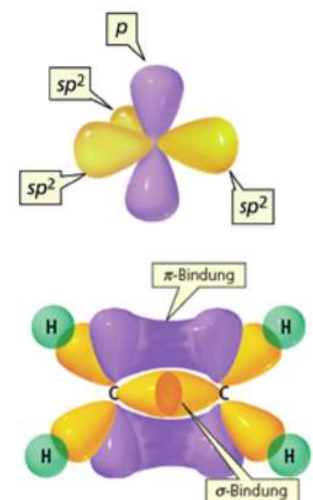


Allgemein: aus s- und n p-Orbitalen, entstehen sp^n -Hybridorbitale (auch sp^1 und $sp^2 \rightarrow$ linear (180°) und eben (120°), hierbei handelt es sich um anorganische Verbindungen oder Mehrfachbindungen)

- C-C Bindung entsteht durch Überlappung zweier sp^3 -Hybridorbitale
- C-H Bindung entsteht durch Überlappung von sp^3 - und s-Orbital

Doppelbindung Beispiel Ethen:

- sp^2 -Hybridisierung: Kombination von 2s- und zwei 2p-Orbitalen; ein unverändertes $2p_z$ -Orbital
- Besteht aus einer starken σ -Bindung und einer schwachen π -Bindung
- Die σ -Bindung entsteht aus Überlappung zweier sp^2 -Orbitale bei der C=C Bindung bzw. von sp^2 -Orbital und s-Orbital bei der C-H Bindung
- Die π -Bindung entsteht durch seitliche Überlappung der zwei p_z -Orbitalen ober und unter der Ebene; diese Bindung lässt sich leicht lösen



Dreifachbindung Beispiel Ethin C_2H_2 :

- sp -Hybridisierung, 2 unveränderte p-Orbitale
- σ -Bindung durch sp - sp -Überlappung, zwei π -Bindungen durch seitliche Überlappung der p-Orbitale

3.) Verbindungsklassen

- Kohlenwasserstoffe: bestehen nur aus C- und H-Atomen
- Funktionale Verbindungen mit Heteroatomen (O, N, S, P, ...)

Funktionelle Gruppe Formel	Funktionelle Gruppe (= Verbindungsklasse)	Präfix	Suffix
$R-CO_2H$	Carbonsäure	Carboxy-	-(carbon)säure
$R-CO_2^-$	Carbonsäureanion (Carboxylat)	Carboxylato-	-carboxylat, -oat
$R-CO_2R'$	(Carbonsäure)ester	Carbonyloxy- oder Oxy-carbonyl-	-oat, -ester
$R-C(=O)X$	Carbonsäurehalogenid	Halogenformyl- Halocarbonyl-	-säurehalogenid, -oylhalogenid
$R-C(=O)NR'R''$ primär: $R' = R'' = H$ sekundär: $R' = \text{Alkyl}$, $R'' = H$ tertiär: $R', R'' = \text{Alkyl}$	Amid (primär/sekundär/tertiär)	Carbamoyl- (prim.), -amido- (sek.)	-säureamid, -carboxamid
$R-CN$	Nitril	Cyan-	-nitril, -carbonitril
$R-CHO$	Aldehyd	Formyl-	-al (-carb(ox)aldehyd)
$RR'C=O$	Keton	Oxo-	-on
$R_2C(OR')_2$	Acetal	Di(alkyloxy)-	-acetal
$R-OH$	Alkohol	Hydroxy-	-ol
$RNR'R''$	Amin primär: $R' = R'' = H$ sekundär: $R' = \text{Alkyl}$, $R'' = H$ tertiär: $R', R'' = \text{Alkyl}$	Amino-	-amin
$R-O-R'$	Ether	Alkoxy-	-ether

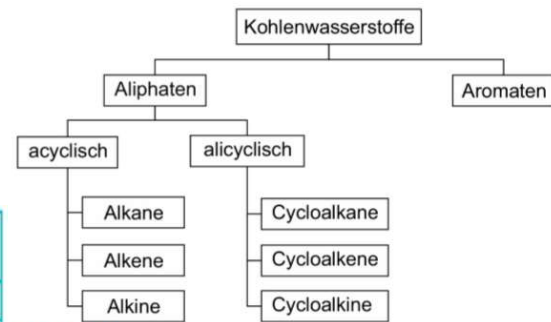


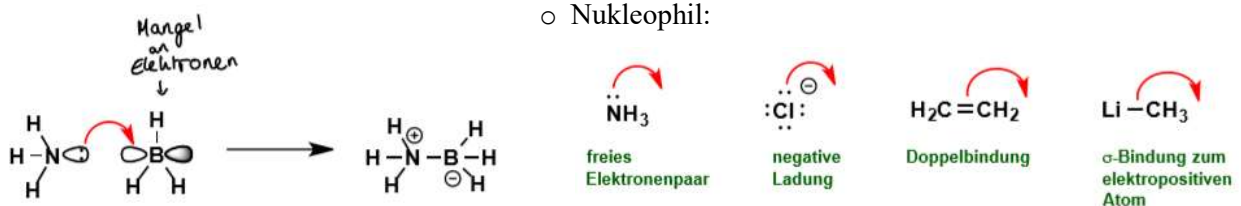
Abbildung 9.6: Einteilung der Kohlenwasserstoffe

4.) Organische Reaktionen

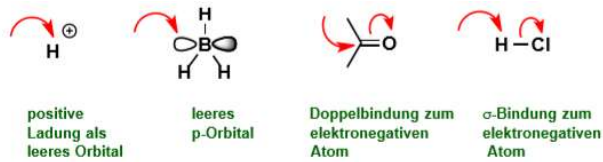
- Damit eine Reaktion abläuft muss Aktivierungsenergie zugeführt werden (Elektronenhülle stoßen sich ab)
- Ladungen und Orbitalüberlappung bringen Moleküle zusammen
- Bei einer chemischen Reaktion findet eine Bewegung von Elektronen zwischen den Molekülen statt
- Der Reaktionsmechanismus ist eine detaillierte Beschreibung der Elektronenbewegung

Nukleophil, Elektrophil

- Die Reaktion findet meistens zwischen einem Elektrophil (Kation, E^+ sucht neg. geladenes Teilchen) und einem Nukleophil (Anion, Nu^- sucht pos. geladenes Teilchen) statt
- Nukleophil mit freiem Elektronenpaar und Elektrophil mit leerem Orbital ziehen sich an (Ladungen) → Reaktion
- Beispiele:



○ Elektrophil:



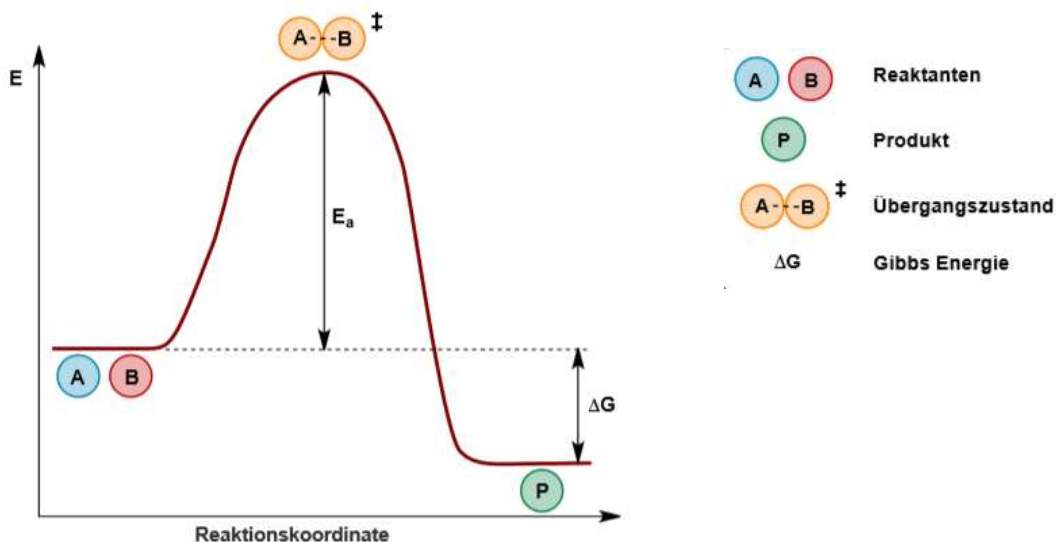
Häufig auftretende Teilchen:

Teilchen	Abkürzung	Eigenschaft	Beispiele
Nucleophil	Nu oder Nu ⁻	Teilchen mit erhöhter Elektronendichte, besitzt freies Elektronenpaar (= Lewis-Base), negativ geladen oder neutral	OH ⁻ , H ₂ O, ROH, NH ₃ , RNH ₂ , RSH, RS ⁻ , Halogenidanionen X ⁻ , CN ⁻ , Carbanionen R ⁻
Elektrophil	E oder E ⁺	Teilchen mit erniedrigter Elektronendichte, weist eine Elektronenlücke auf (= Lewis-Säure) oder besitzt eine positive Partialladung, neutral oder positiv geladen	H ⁺ , NO ⁺ , SO ₃ , Halogene X ₂ , NO ₂ ⁺ , Alkylhalogenide R-X, Carbokationen R ⁺ , Carbonylgruppen RR'C=O
Radikal	R•	Teilchen mit ungepaarten Elektronen, meistens neutral, seltener negativ oder positiv geladen	Alkylradikale R•, Sauerstoff O ₂ , NO, Halogenatome X•

Reaktionstypen:

- Substitution: Ersetzung des Substituenten
- Addition: Aus zwei Teilchen entsteht ein Teilchen (Auflösen einer Mehrfachbindung)
- Eliminierung: Von einem Teilchen wird ein Teilchen abgespalten (Entstehung einer Mehrfachbindung)
- Umlagerung: Ein Teilchen wandelt sich in ein isomeres Teilchen um

Reaktionsverlauf:

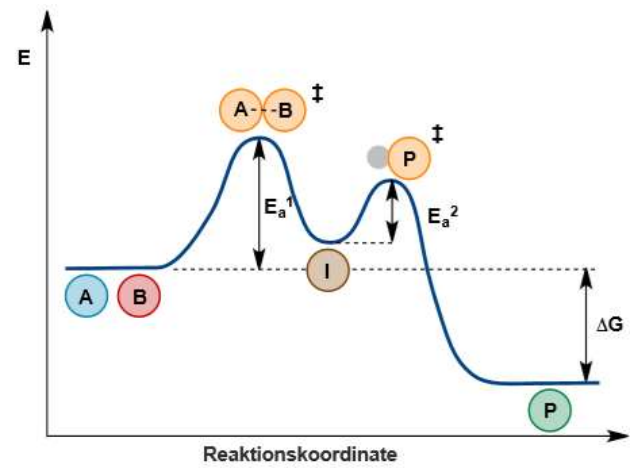


- Gleichgewichtskonstante: $K_{eq} = \frac{[P]}{[A][B]}$
- Die Thermodynamik beschreibt die Lage des GG (wieviel Edukt / Produkt) und die Kinetik die Geschwindigkeit
- Aktivierungsenergie E_a beschreibt die energetische Hürde der Reaktion

- Einstufige Reaktion: ein Übergangszustand
- Zweistufige Reaktion: Zwischenstufe und zwei Übergangszustände

Reaktionsgeschwindigkeit (Faktoren):

- Beweglichkeit der Teilchen (Aggregatzustand)
- Konzentration
- Kinetische Energie (Temperatur)
- Katalysator (alternativer Reaktionspfad)



8.) Kohlenwasserstoffe

1.) Alkane

Homologe Reihe der Alkane:

- Allgemeine Form: C_nH_{2n+2}
- Unlöslich in Wasser: lipophil, hydrophob
- Siede- und Schmelzpunkte steigen mit wachsender Kohlenstoffkette (C1-C4 Gase, bis C20 flüssig)

Konstitutionsisomerie

Zu einer Summenformel gibt es mehrere mögliche Strukturformeln z.B. Butan und Isobutan (2-Methylpropan)

Nomenklatur

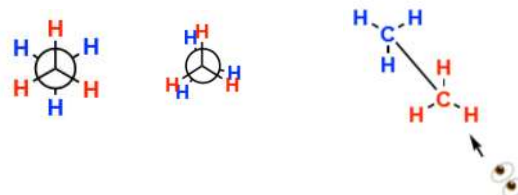
- 1) Längste Kette im Molekül finden und benennen
 - Bei mehreren gleich langen Ketten, Kette mit den meisten Substituenten wählen
- 2) Nummerierung der C-Atome der längsten Kette von dem Ende, dass einem Substituenten am nächsten ist
 - Bei gleichem Abstand: Substituenten der früher im Alphabet kommt
 - Zählt man in einer Seitenkette ist C1 an Hauptkette gebunden
- 3) Name des Alkans
 - Zuerst Seitenketten in alphabetischer Reihenfolge mit Nummer des C-Atoms davor
 - Mehrfaches Auftreten einer Gruppe: Di-, Tri-, Tetra-

Alkan		Alkylrest	
Name	Summenformel	Name	Summenformel
Methan	CH_4	Methyl- (= Me-)	$-CH_3$
Ethan	C_2H_6	Ethyl- (= Et-)	$-C_2H_5$
Propan	C_3H_8	Propyl- (= Pr-)	$-C_3H_7$
Butan	C_4H_{10}	Butyl- (= Bu-)	$-C_4H_9$
Pentan	C_5H_{12}	Pentyl-	$-C_5H_{11}$
Hexan	C_6H_{14}	Hexyl-	$-C_6H_{13}$
Heptan	C_7H_{16}	Heptyl-	$-C_7H_{15}$
Octan	C_8H_{18}	Octyl-	$-C_8H_{17}$
Nonan	C_9H_{20}	Nonyl-	$-C_9H_{19}$
Dekan	$C_{10}H_{22}$	Decyl-	$-C_{10}H_{21}$
Undecan	$C_{11}H_{24}$	Undecyl-	$-C_{11}H_{23}$
allgemein	C_nH_{2n+2}	Alkyl-	$-R$

Drehbarkeit

Um die C-C Einfachbindung herrscht freie Drehbarkeit, durch die Rotation entstehen verschiedene Konformationen (räumliche Anordnungen, Singular: Konformer)

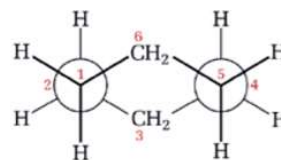
- Gestaffelt: Substituenten sind versetzt (stabiler)
- Eklptisch: Substituenten sind nicht versetzt
- Bild: Newman-Projektion (links)
- Alternativ: Sägebock Darstellung (rechts)



Cycloalkane

Name	Cyclopropane	Cyclobutane	Cyclopentane	Cyclohexane
Molecular Formula	C_3H_6	C_4H_8	C_5H_{10}	C_6H_{12}
Structural Formula				
Line Formula				

- Cyclohexan: Sesselkonformation ist Spannungsfrei (idealer Tetraederwinkel von $109,5^\circ$)
 - Energetisch günstigster Zustand



Newman-Projektion der Sesselkonformation

Reaktivität:

- Unreaktiv; starke, unpolare C-C und C-H Bindungen
- Keine Ausbildung von Ionen (heterolytische Bindungsspaltung)
- Reaktion mit Radikalen (homolytische Bindungsspaltung)

2.) Alkene

- Homologe Reihe: C_nH_{2n}
- Doppelbindung, Kennzeichnung durch -en am Ende des Namens
- Ethen, Propen, 1-Buten, ...

Nomenklatur:

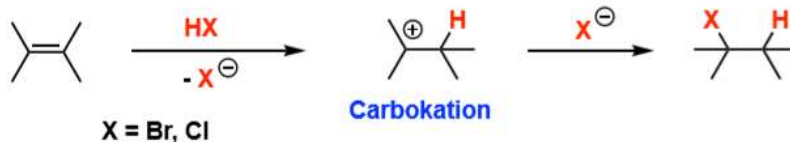
- 1) Analog zur Nomenklatur der Alkane, Alkene enden auf -en
- 2) Längste Kette, welche Mehrfachbindungen enthält
- 3) Ziffer gibt das C-Atom an, an welchem die Doppelbindung beginnt; Ziffer, welche die Doppelbindung angibt, steht zwischen den Seitenketten und dem Namen des Alkens
 - Z.B. 2-Methyl-1-buten

Isomerie:

- Viele Konstitutionsisomere möglich, z.B. verschobene Doppelbindung, cyclisch
- Geometrisch Isomerie:
 - Doppelbindung ist nicht drehbar
 - cis- und trans-Form

Reaktivität:

- π -Bindung ist für Reaktivität verantwortlich
- bevorzugte Reaktion: Additionsreaktion; ein Molekül (z.B. Cl_2) lagert sich unter Aufhebung der π -Bindung an das Alken an $\rightarrow$ aus der Doppelbindung wird eine Einfachbindung
- Elektrophil (Teilchen, das mit partiell negativ geladenen Teilchen reagieren möchte) greift π -Bindung des Alkens an

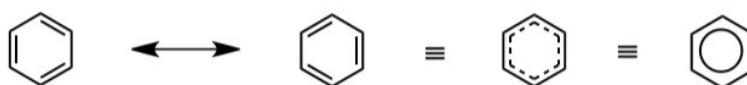


3.) Alkine

- Dreifachbindung, homologe Reihe: C_nH_{2n-2}
- Nomenklatur: Enden auf -in; Doppelbindungen haben bei der Nummerierung Priorität

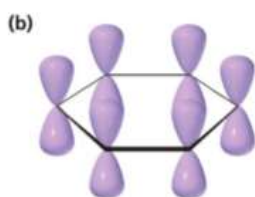
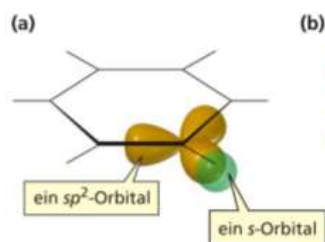
4.) Aromaten

Benzol: C_6H_6



- Bildet Grundlage aller aromatischen Verbindungen

- Alle Bindungen gleich lang: zwischen Einfach- und Doppelbindung
- Sehr stabil aufgrund der delokalisierten π -Elektronen, sehr geringe Reaktivität



grün: s-Orbital des H-Atoms

in der Ringebene sp^2 -Orbitale, senkrecht dazu p-Orbital (lila): überlappen mit benachbarten Orbitalen

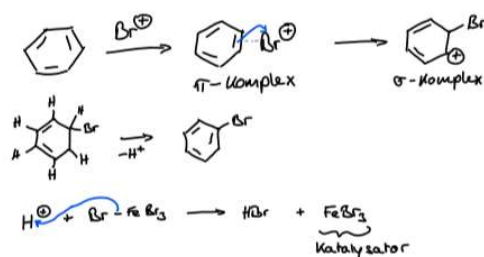
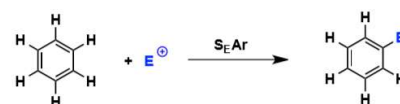
→ Elektronenwolken über und unter dem Ring

Kriterien für Aromatizität:

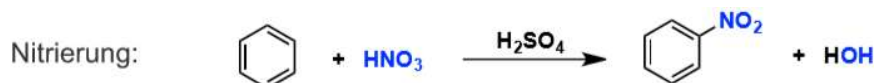
- Hückel-Regel: $4n+2$ π -Elektronen (planare, cyclisch konjugierte Systeme), mit n = Anzahl der Ringe
- Antiaromatisch: $4n$ π -Elektronen, destabilisiert

Reaktionen:

- Benzol ist nukleophil und reagiert mit sehr reaktiven Elektrophilen (elektrophile aromatische Substitution S_EAr)
- Reaktion nur unter Anwesenheit eines Katalysators (z.B. $FeBr_3$)
- Reaktionsmechanismus:



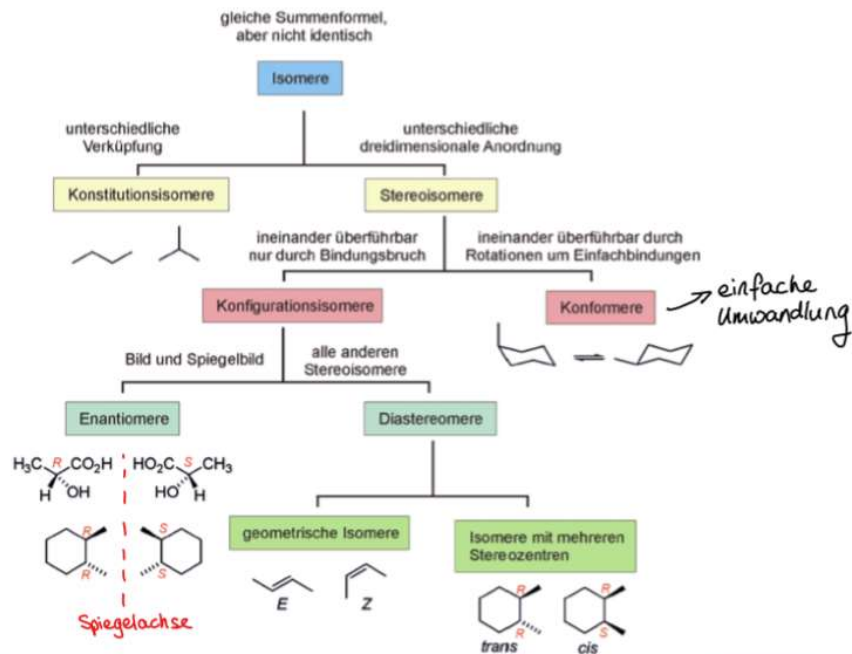
Reaktion	Bedingungen	Elektrophil E^+	Produkt
Halogenierung	$X_2 + FeX_3$	$X^+FeX_4^-$	Ph-X Halogenaromat
Nitrierung	$HNO_3 + H_2SO_4$	NO_2^+ Nitroniumion	Ph- NO_2 Nitroaromat
Sulfonierung	$SO_3 + H_2SO_4$	HSO_3^+	Ph- SO_3H Sulfonsäure



9.) Organische Chemie: Einfache funktionelle Gruppen

1.) Stereoisomerie

Übersicht Isomerie:

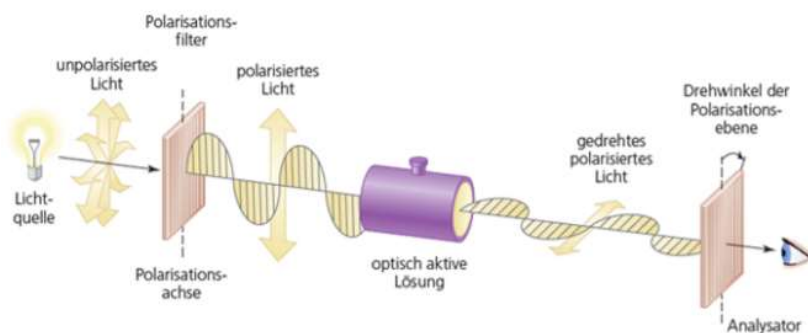


Chiralität:

- Ein C-Atom mit vier verschiedenen Substituenten (Resten) ist chiral
- Die beiden möglichen Stereoisomere verhalten sich wie Bild und Spiegelbild, sie werden Enantiomere genannt
- Enantiomere haben die gleichen chemischen Eigenschaften, außer in chiraler Umgebung (z.B. Proteine aus L-AS, die durch drei-Punkt-Erkennung Enantiomere unterscheiden können)
 - Z.B. unterschiedliche Gerüche, Drehung von polarisiertem Licht
- Racemat: 1:1 Mischung beider Enantiomere

Drehung von polarisiertem Licht:

Aufbau Polarimeter



- Chirale Moleküle sind optisch aktiv

Nomenklatur:

Bestimmung der Konfiguration: (R/S)

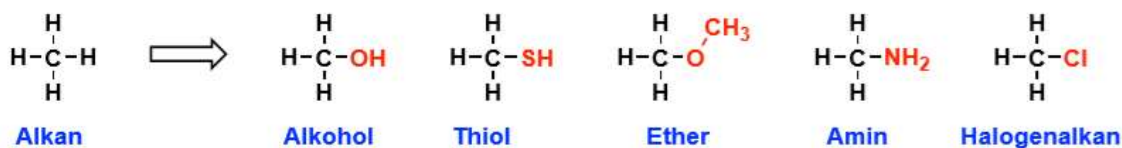
- 1) Priorisierung der Substituenten am C-Atom
 $1 > 2 > 3 > 4$
 - Direkt gebundene Atome: Priorität steigt mit Ordnungszahl
 - Gleiche Bindungspartner: OZ des nächsten Bindungspartners
 - Doppelt gebundene Atome haben höhere Priorität als einfach gebundene
- 2) Drehung des Moleküls, so dass niedrigste Priorität (4) nach hinten zeigt
- 3) Restliche drei Substituenten: Kreis im oder gegen den Uhrzeigersinn → (R) / (S) (rechts, links)
 - Fischer Projektion ist veraltet

Bezeichnung	Bedeutung	Wie bestimmt?
(R) und (S)	absolute Konfiguration, kann für jedes Stereozentrum einer Verbindung bestimmt werden	CIP-Regeln
D und L	absolute Konfiguration eines ganz bestimmten Stereozentrums in einer Aminosäure oder in einem Zucker	Fischer-Projektion
(+) und (-)	Vorzeichen der optischen Aktivität (des gesamten Moleküls)	experimentell

Diastereomere: Alle Stereoisomere, die keine Enantiomere sind

- Bei Molekülen mit mehr als einem Chiralitätszentrum
- E/Z-Isomere
- Unterschiedliche chemische und physikalische Eigenschaften

2.) Alkohole, Ether, Halogenalkane, Amine



Nomenklatur:

Funktionelle Gruppe (Formel)	Verbindungs-kategorie	Präfix	Suffix
ROH	Alkohol	Hydroxy-	-ol
RSH	Thiol	Merkapto-	-thiol
ROR	Ether	Alkoxy- (Methoxy-, Ethoxy-)	-ether
RNH ₂ , R ₂ NH, R ₃ N	Amin	Amino-	-amin
RCI	Alkylchlorid	Chloro-	(-chlorid)

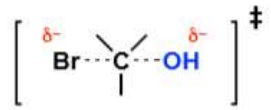
- 1) Längste Kette, welche funktionelle Gruppe enthält, Nummerierung der C-Atome, so dass funktionelle Gruppe eine möglichst niedrige Zahl hat
- 2) Funktionelle Gruppe durch Endung des Namens: -ol (Hydroxy-Gruppe), -al (Aldehyde), ...
- 3) Gleiche funktionelle Gruppen: di-, tri-, ...; Stellung der funkt. Gruppen durch Zahlen vor Endung
- 4) Halogenatome werden wie Seitenglieder behandelt: Präfix + Stammname

Primäre, sekundäre, tertiäre Alkohole und Amine:

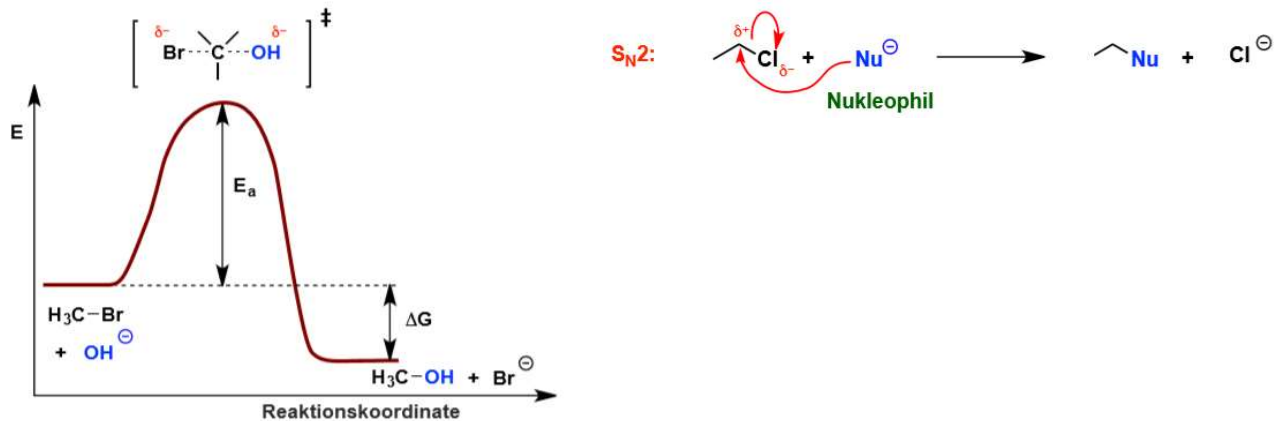
Anzahl der Reste: primär (1), sekundär (2), ...

3.) S_N2 Reaktion

- S_N2 steht für bimolekulare nukleophile Substitution (1 Reaktionsschritt)
- Das Cl ist die Abgangsgruppe
- Bindungsbruch und Bindungsneubildung erfolgen gleichzeitig: Übergangszustand, aber keine Zwischenstufe (einstufige Reaktion)



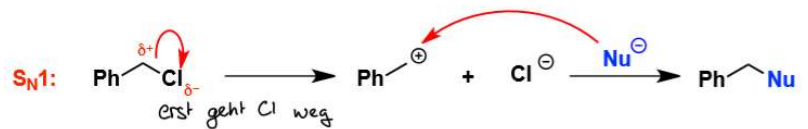
Energieprofil:



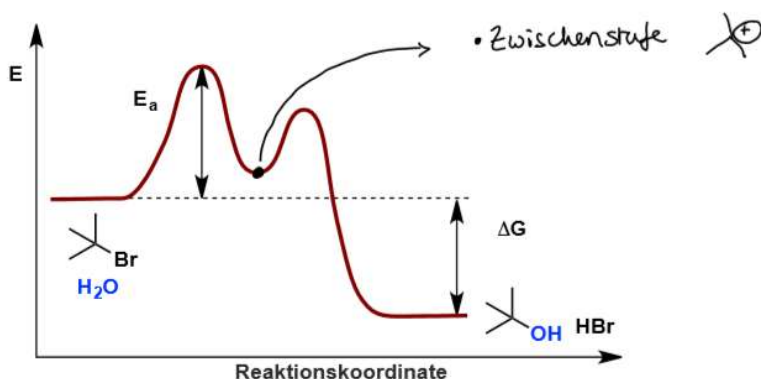
- Reaktion findet am besten mit kleinen Substituenten (primäre Alkylketten) statt, meist über Rückseitenangriff
- Bei chiralen Substraten findet eine Inversion der Konfiguration statt (aufgrund des Rückseitenangriffs)
- Reaktion 2. Ordnung: zwei Moleküle sind am Übergangszustand beteiligt

4.) S_N1 Reaktion

- Monomolekulare nukleophile Substitution
- Reaktion hat eine Zwischenstufe: Carbokation (zweistufige Reaktion)



Energieprofil:



- Reaktion 1. Ordnung: Geschwindigkeit hängt vom Substrat ab
- Der erste Reaktionsschritt ist Geschwindigkeitsbestimmend
- Mechanismus:



Überblick:

	S_N1 -Reaktion	S_N2 -Reaktion
Reaktionsverlauf	mehrstufig	einstufig
langsamster Schritt	monomolekular	bimolekular
zeitliche Abfolge der Bindungsänderungen	erst Bindungsbruch, dann Bindungsneubildung	Bindungsbruch und Bindungsneubildung gleichzeitig
Zwischenstufe	Carbeniumion	keine
Kinetik	1. Ordnung $v = k \cdot [RX]$	2. Ordnung $v = k \cdot [RX] \cdot [Nu^-]$
Stereochemie	Racemisierung $\neq$	Inversion der Konfiguration
entscheidender Faktor	Stabilität des Carbeniumions	Sterische Zugänglichkeit des angegriffenen elektrophilen C-Atoms
Substrate	tertiär und sekundär	Methyl-, primär und sekundär

5.) Carbonylverbindungen, Carbonsäuren

- Zu den Carbonylverbindungen zählen Aldehyde ($Y = H$) und Ketone ($X, Y = R$)
- Zu den Carbonsäurederivaten ($COOH$) zählen Ester ($Y = OR$), Amide ($Y = NR_2$), Carbonsäurechlorid ($Y = Cl$)



Nomenklatur:

Funktionelle Gruppe (Formel)	Verbindungs-klasse	Präfix	Suffix
RCHO	Aldehyd	Formyl-	-al
RCOR'	Keton	Oxo-	-on
RCOOH	Carbonsäure	Carboxy-	-säure
RCOOR'	Ester	Alkoxycarbonyl-	-säure -ylester

Suffix: Wenn Gruppe Priorität hat

Regeln:

- 1) Längste C-Kette mit funktioneller Gruppe, funktionelle Gruppe mit höchster Priorität hat niedrigste Ziffer
- 2) Endungen: -al (Aldehyd-Gruppe), -on (Keton-Gruppe), -amin (Amino-Gruppe), -säure (Carbonsäure-Gruppe)
 - Nur mit höchster Priorität Endsilbe, ansonsten Vorsilbe
- 3) Nummerierung vor Endung und di-, tri-, tetra- bei Mehrfachnennungen

Prioritäten: Carbonsäuren > Ester > Carbonsäurechloride > Amide > Aldehyde > Ketone > Alkohole > Thiole > Amine > Alkene > Alkine > Halogenverbindungen