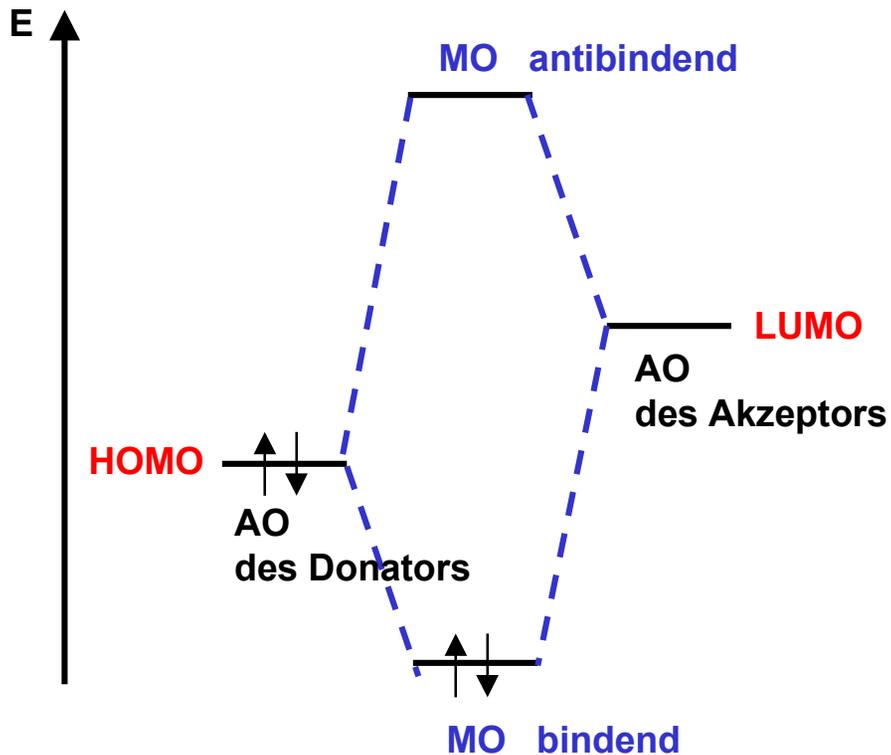
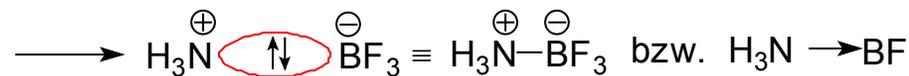
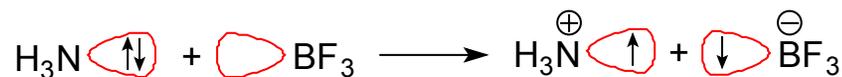
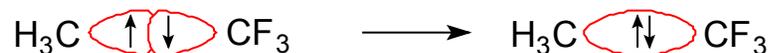
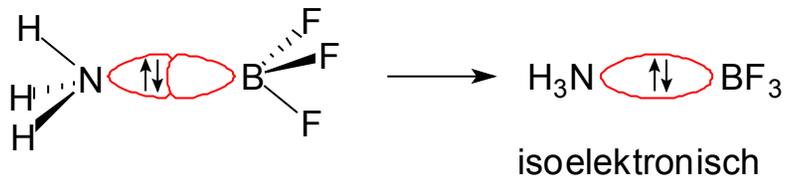


MO-Diagramm



HOMO - Highest Occupied MO
LUMO - Lowest Unoccupied MO

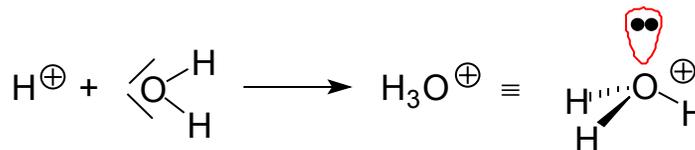
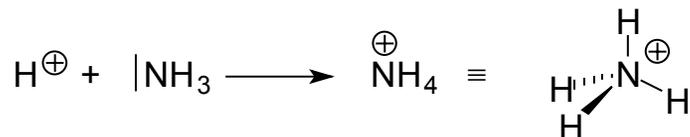
Beispiel: H_3NBF_3

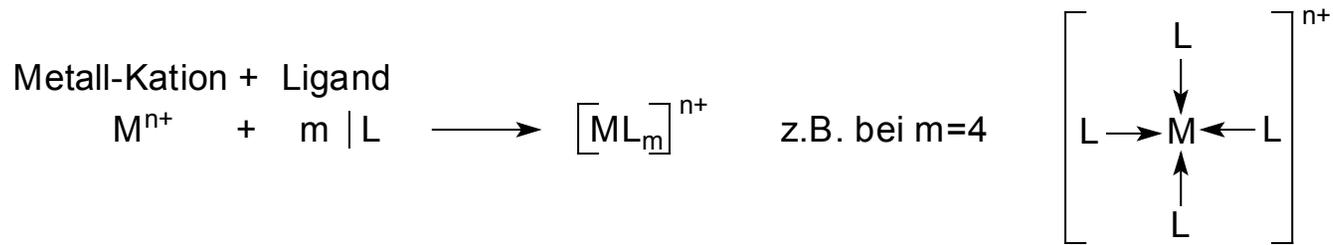


Weitere Beispiele:

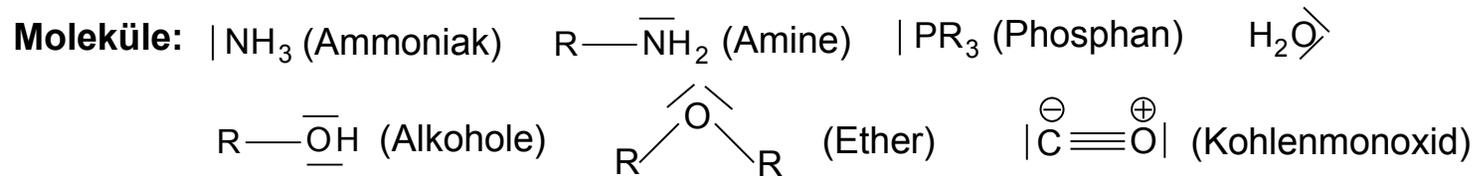
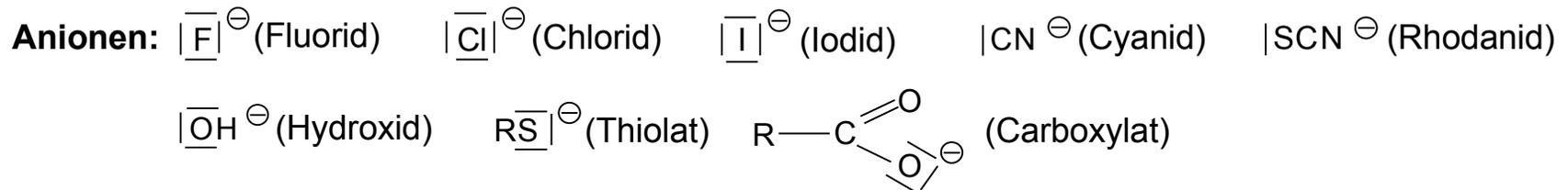
Akzeptor + Donator

Ammoniumion

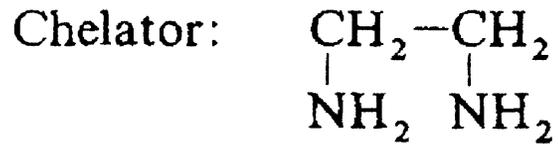




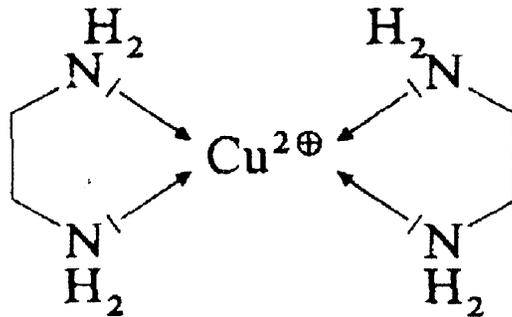
Beispiele von Anionen oder Molekülen, die Liganden in Metallkomplexen sein können.



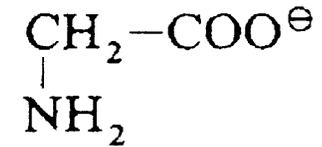
Beispiel: $\text{K}[\text{Fe}^{2+}(\text{Fe}^{3+}(\text{CN})_6)]$ Berliner-Blau



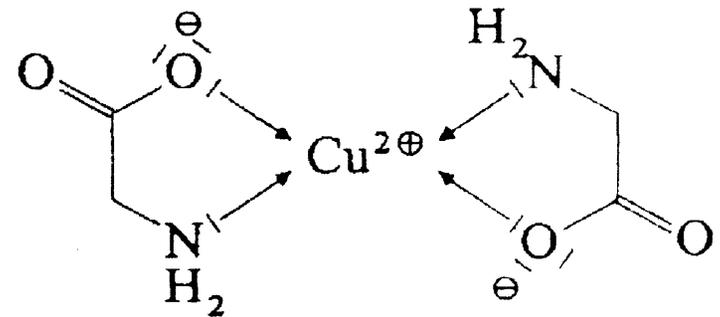
Ethylendiamin (en)



Bis(ethylendiamin)-
kupfer(II)-Komplex



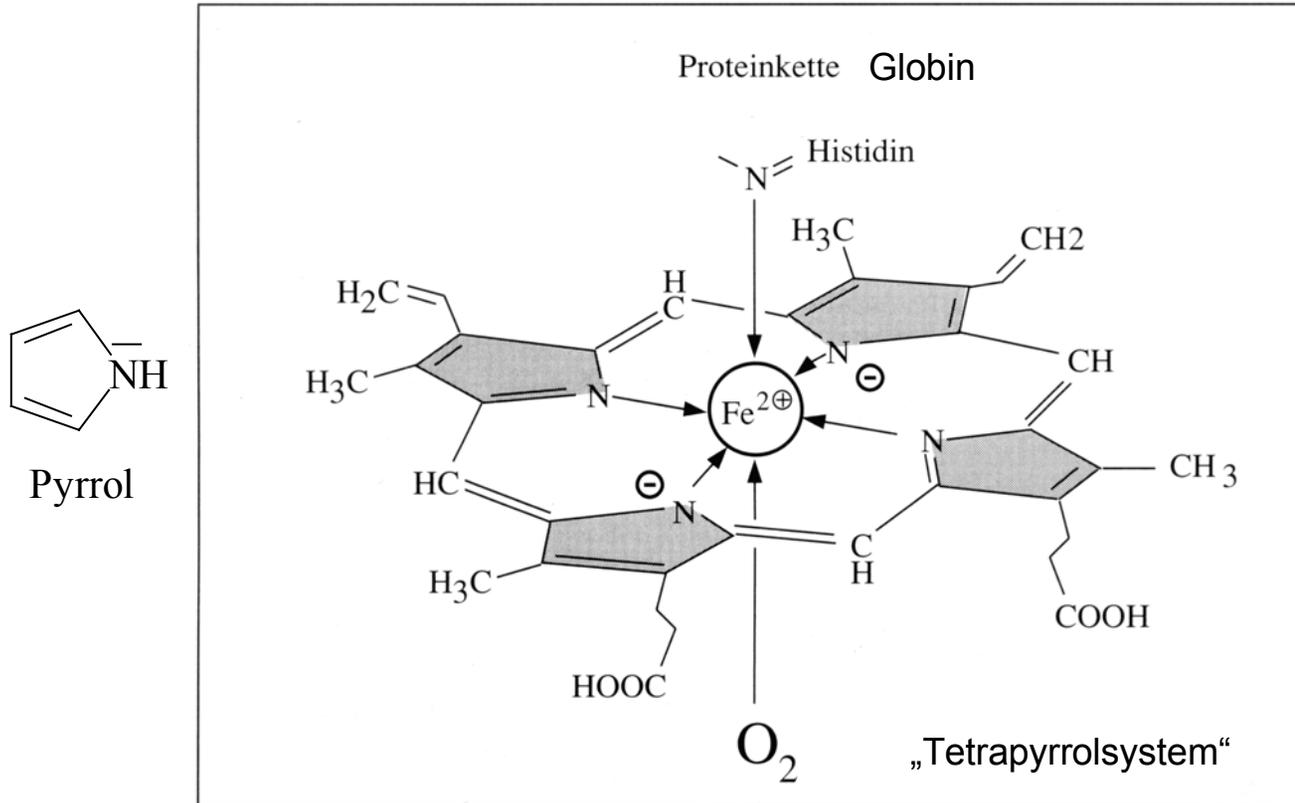
Glycinat



Bis(glycinato)-
kupfer(II)-Komplex

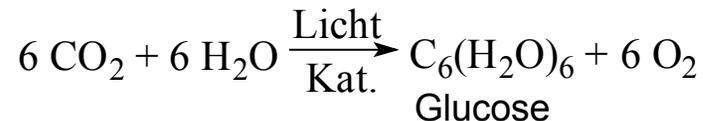
Hamoglobin: Sauerstoff-Transport im Blut

Struktur des Häms mit den zusätzlichen Liganden im Hämoglobin (Histidin der Proteinkette und Sauerstoff).



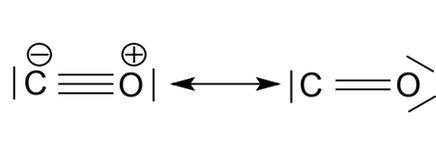
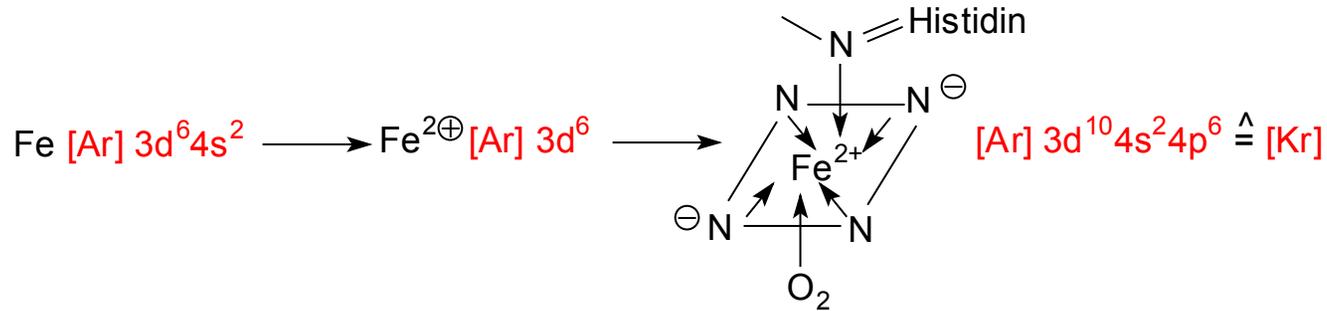
Weitere lebenswichtige Tetrapyrrolsysteme

Chlorophyll (Zentralion: Mg^{2+}): Farbstoff der grünen Pflanze wichtig bei der Photosynthese:

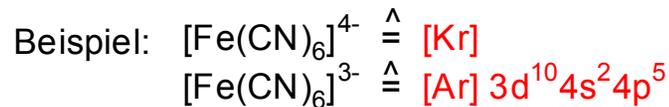


Vitamin B₁₂ (Zentralatom: Co^{3+}) gegen perniziöse Anämie

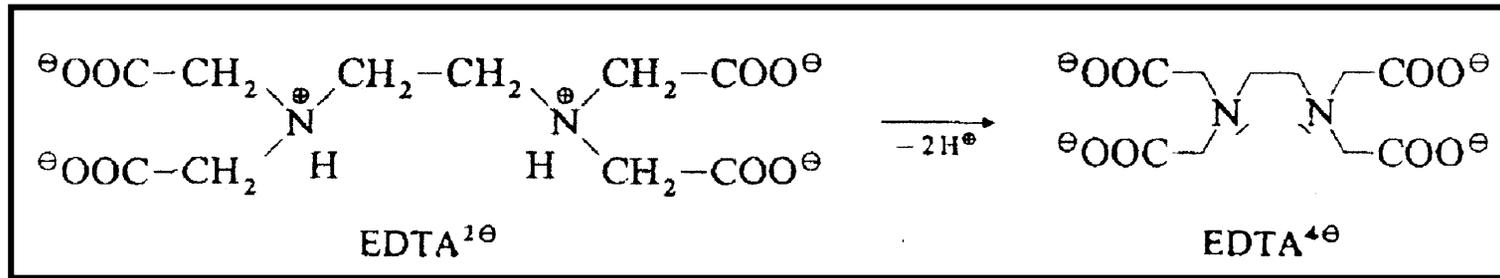
Elektronenkonfiguration des zentralen Eisen (II)-Kations im Häm-Komplex Folie070



{ Starkes Atemgift, weil CO stärker als O_2 an das Fe^{2+} -Ion des Häms bindet. \Rightarrow Störung des O_2 -Transportes.



ETDA – Ethylendiamintetraessigsäure



Verwendung von künstlichen Chelatoren:

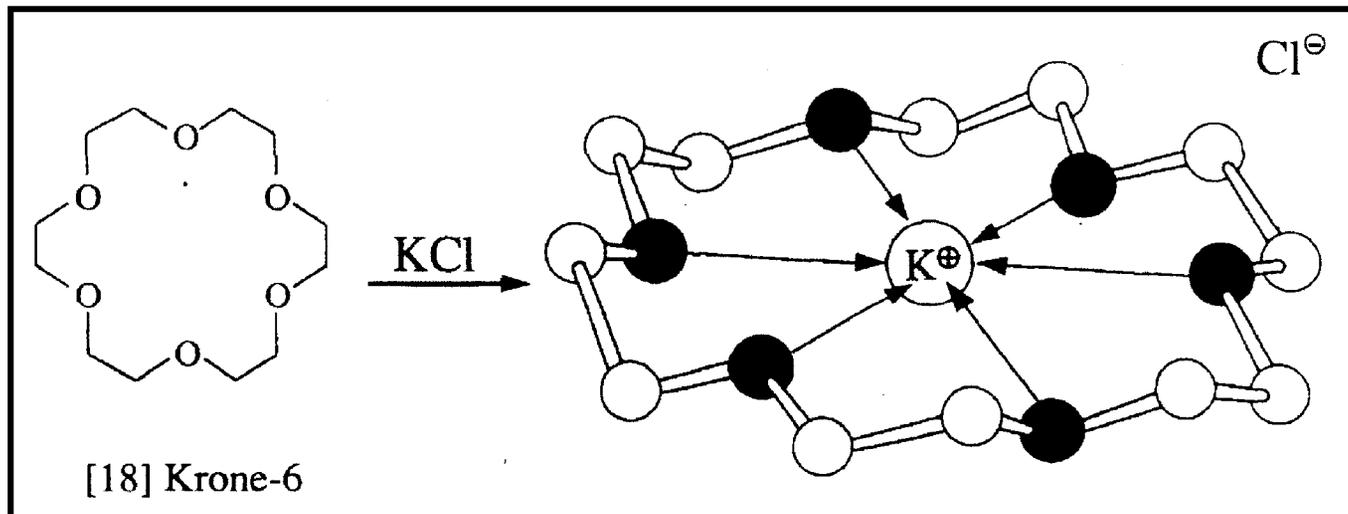
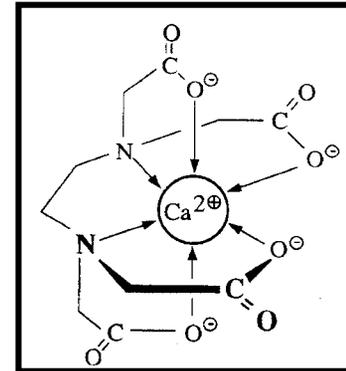
1) Entgiftung

2) Hemmung der Blutgerinnung

Für die Blutgerinnung ist freies Ca^{2+} erforderlich.

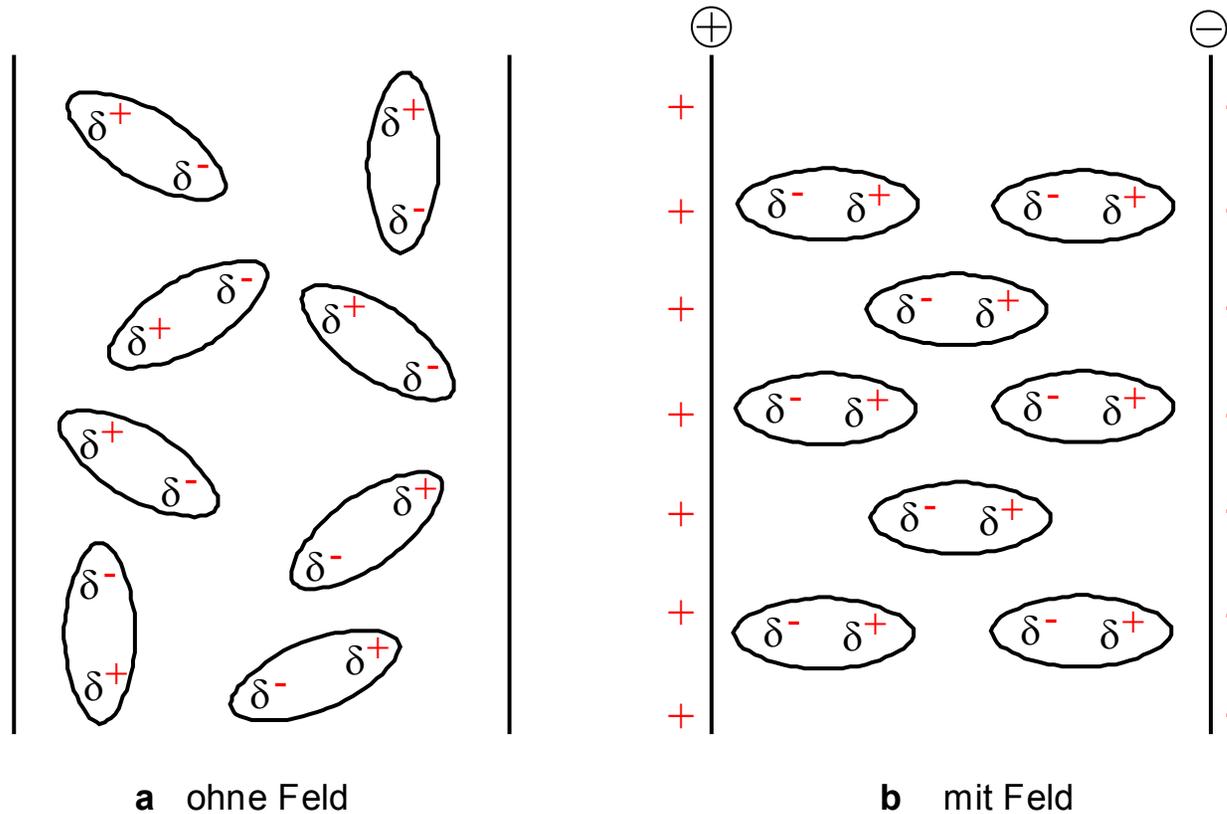
Bei Komplexierung von Ca^{2+} mit EDTA oder Citrat \Rightarrow Hemmung der Blutgerinnung.

Ca^{2+} -haltige Nierensteine lassen sich z.B. durch Verabreichung von EDTA auflösen.



Chelatkomplex von [18] Krone-6 mit K^{\oplus} . Salz: $\text{K}^{\oplus}\text{Cl}^{\ominus}$ unlöslich in organischem Lösungsmittel, dagegen Komplex von $\text{K}^{\oplus}\text{Cl}^{\ominus}$ und [18] Krone-6 löslich in Chloroform oder Benzol.

Dipolmomente



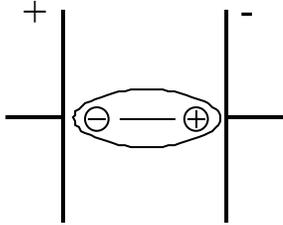
Effekt eines elektrostatischen Feldes auf die Orientierung polarer Moleküle.

Dipolmoment: $\mu = q \cdot d$

d: Abstand zwischen den beiden entgegengesetzten Ladungen

q: Ladungsstärke

Plattenkondensator



$$\text{Kapazität } C = \frac{q}{U} \left(\frac{\text{Ladungsmenge}}{\text{Spannung}} \right)$$

$$\epsilon = \frac{C_{\text{Materie}}}{C_{\text{Vakuum}}}$$

Debye:

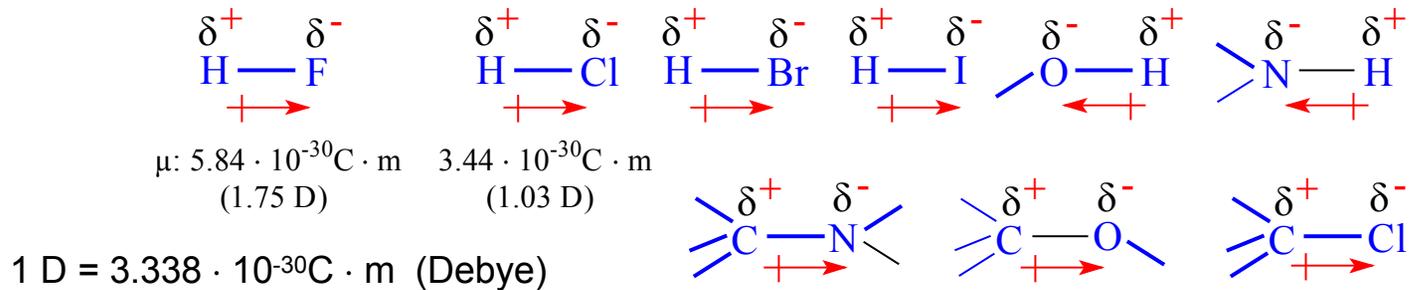
$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \cdot \frac{M}{d} = a + \frac{b}{T}$$

$$b = \frac{4\pi}{3} \cdot N_A \cdot \frac{\mu^3}{3K}$$

M -	Molekulargewicht
d -	Dichte
T -	absolute Temperatur
N_A -	Avogadrozahl
k -	Boltzmannkonstante
μ -	Dipolmoment

	F	O	Cl,N	Br	C	H	Mg	Li
Elektronegativität:	4.0	3.5	3.0	2.8	2.5	2.1	1.2	1.0

Dipolmoleküle



Anwendungsbeispiel:

$\text{H} \text{---} \text{Cl} \rightarrow \text{H}^+ \text{Cl}^-$ $q(\text{H}^+) = q(\text{Cl}^-) = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{C}$ Bindungsabstand: $d(\text{H} \text{---} \text{Cl}) = 127 \text{ pm} = 127 \cdot 10^{-12} \text{m}$

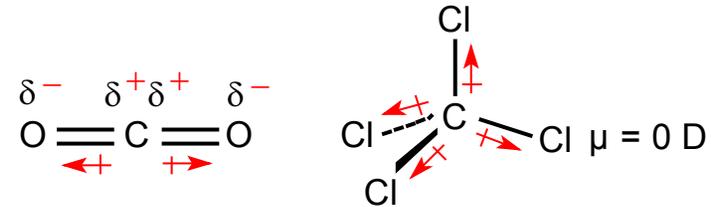
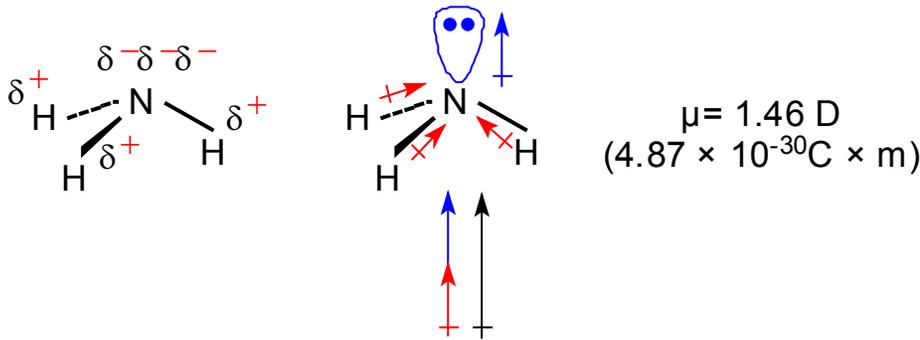
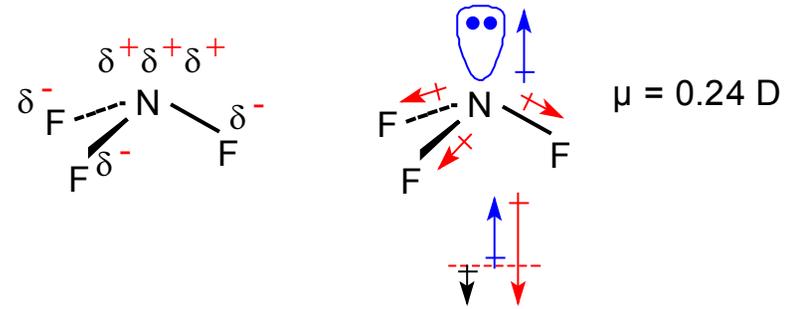
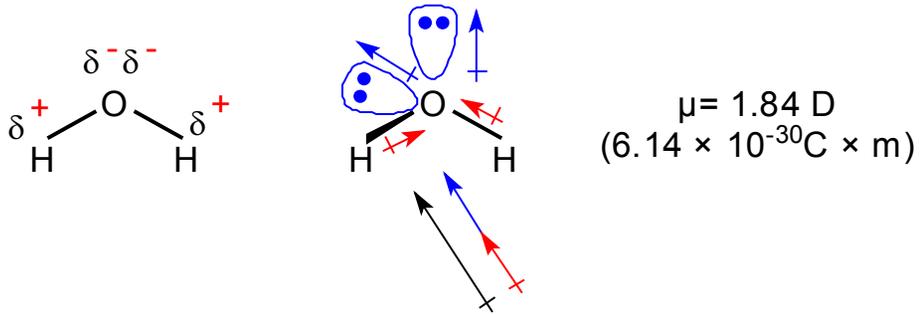
$$\mu(\text{H}^+ \text{Cl}^-)_{\text{ber.}} = 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 127 \cdot 10^{-12} = 2.03 \cdot 10^{-29} \text{C} \cdot \text{m}$$

$$\mu(\text{HCl})_{\text{gem.}} = 3.44 \cdot 10^{-30} \text{C} \cdot \text{m}$$

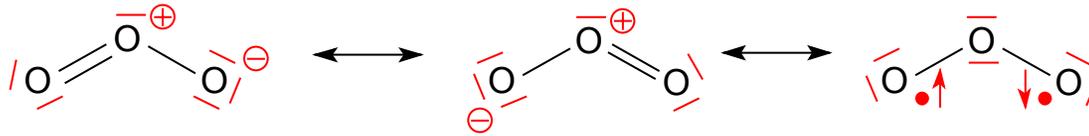
$$\frac{\mu_{\text{gem.}}}{\mu_{\text{ber.}}} = \frac{3.44 \cdot 10^{-30}}{20.3 \cdot 10^{-30}} = 0.169$$

⇒ Die Bindung in HCl-Gas besitzt zu 16.9 % ionischen Charakter.

vektorielle Summe der Bindungsincremente



Mesomerie (Resonanz)



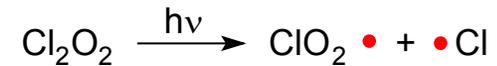
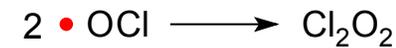
mesomere Grenzstrukturen oder Resonanzstrukturen

Ozon

- Abbau in der Stratosphäre (vereinfacht) durch FCKW (Fluorchlorkohlenwasserstoffe)

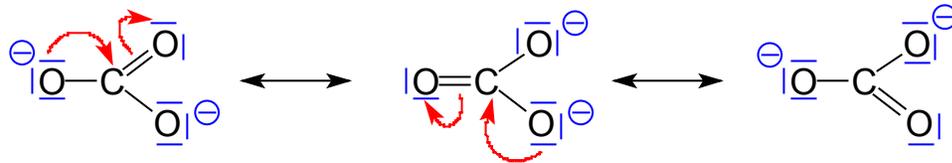


Katalytischer Zyklus



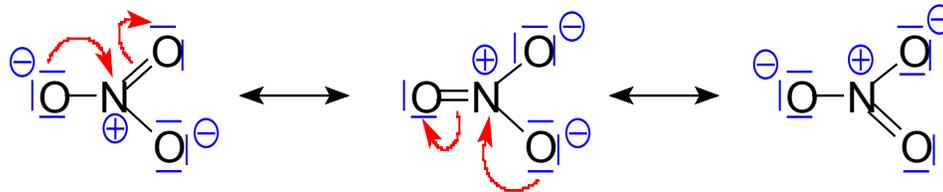
Beispiele für resonanz-stabilisierte Systeme

Carbonat-Dianion: CO_3^{2-} (Dianion der Kohlensäure)

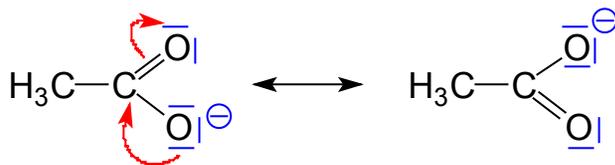


Alle drei C-O-Bindungen sind gleich lang.

Nitrat-Anion: NO_3^- (Anion der Salpetersäure)



Acetat-Anion: CH_3CO_2^- (Anion der Essigsäure)



Beide C-O-Bindungen sind gleich lang und gleich stark.

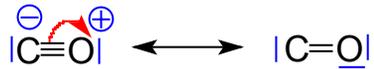
Beispiele für resonanz-stabilisierte Systeme

Cyanat-Anion: OCN^-



Die beiden Resonanzstrukturen sind energetisch nicht gleichwertig und tragen in unterschiedlichem Maß zum Resonanzhybrid bei.

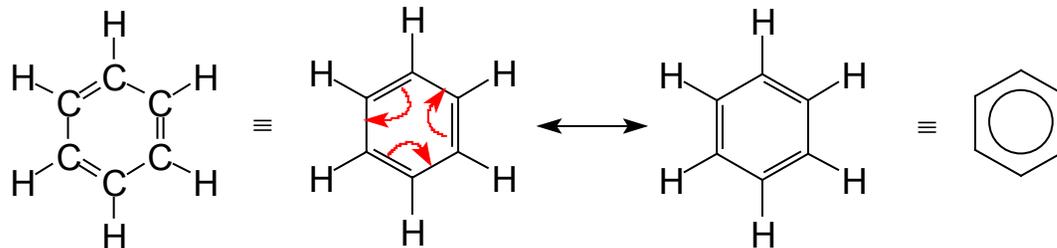
Kohlenmonoxid: CO



jeweils
Elektronen-octett
am C- und O-Atom

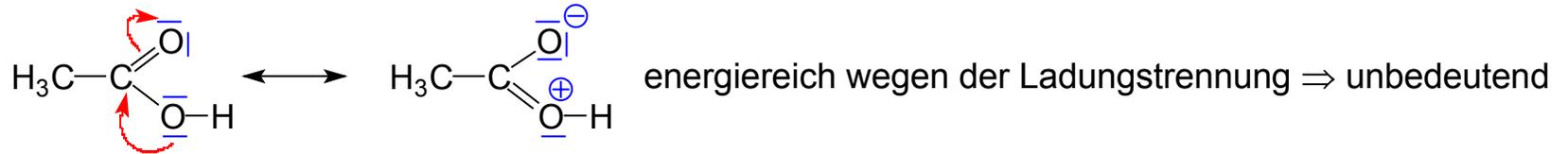
Elektronensextett
am C-Atom \Rightarrow ungünstig

Benzol: C_6H_6



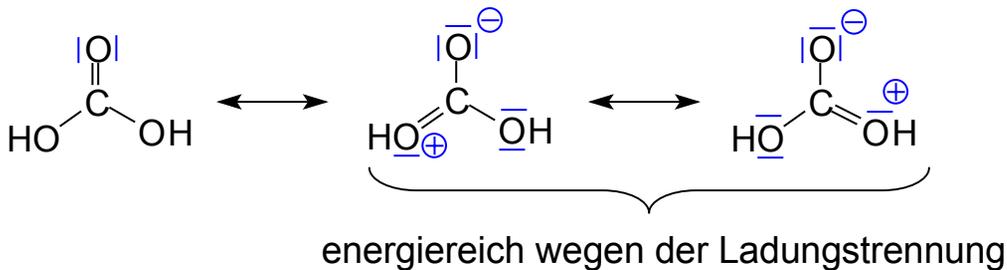
Delokalisierte π -Bindungen

Essigsäure: CH_3COOH



Essigsäure besitzt eine C=O-Doppelbindung und eine C-O-Einfachbindung.

Kohlensäure: H_2CO_3



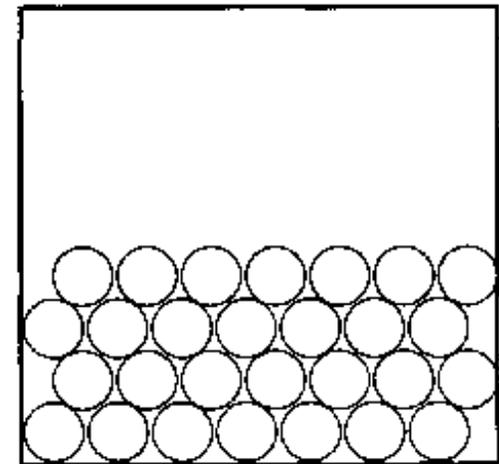
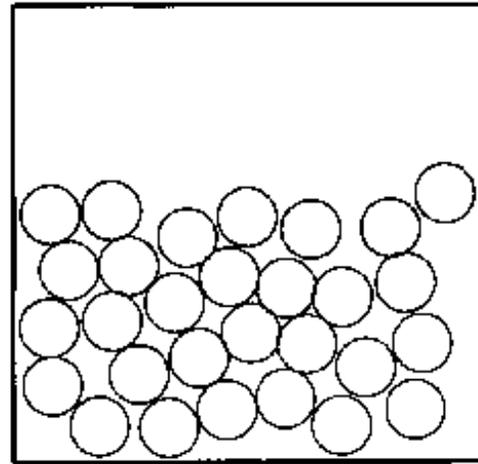
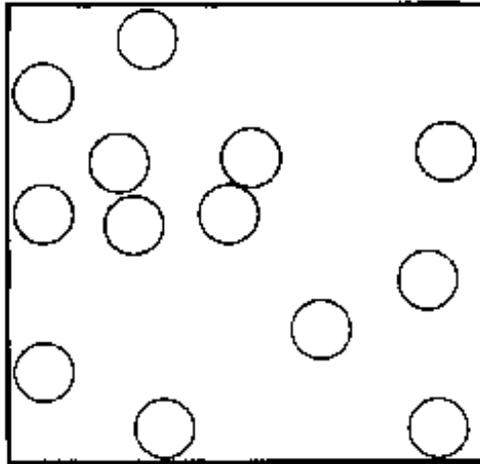
Kohlensäure besitzt eine C=O-Doppelbindung und zwei C-O-Einfachbindungen.

Erscheinungsform der Materie: Aggregatzustände

Erscheinungsform: gasförmig (g) flüssig (l) fest (s)

E_{kin} :
→
 nimmt ab

Ordnung: nimmt ab
←



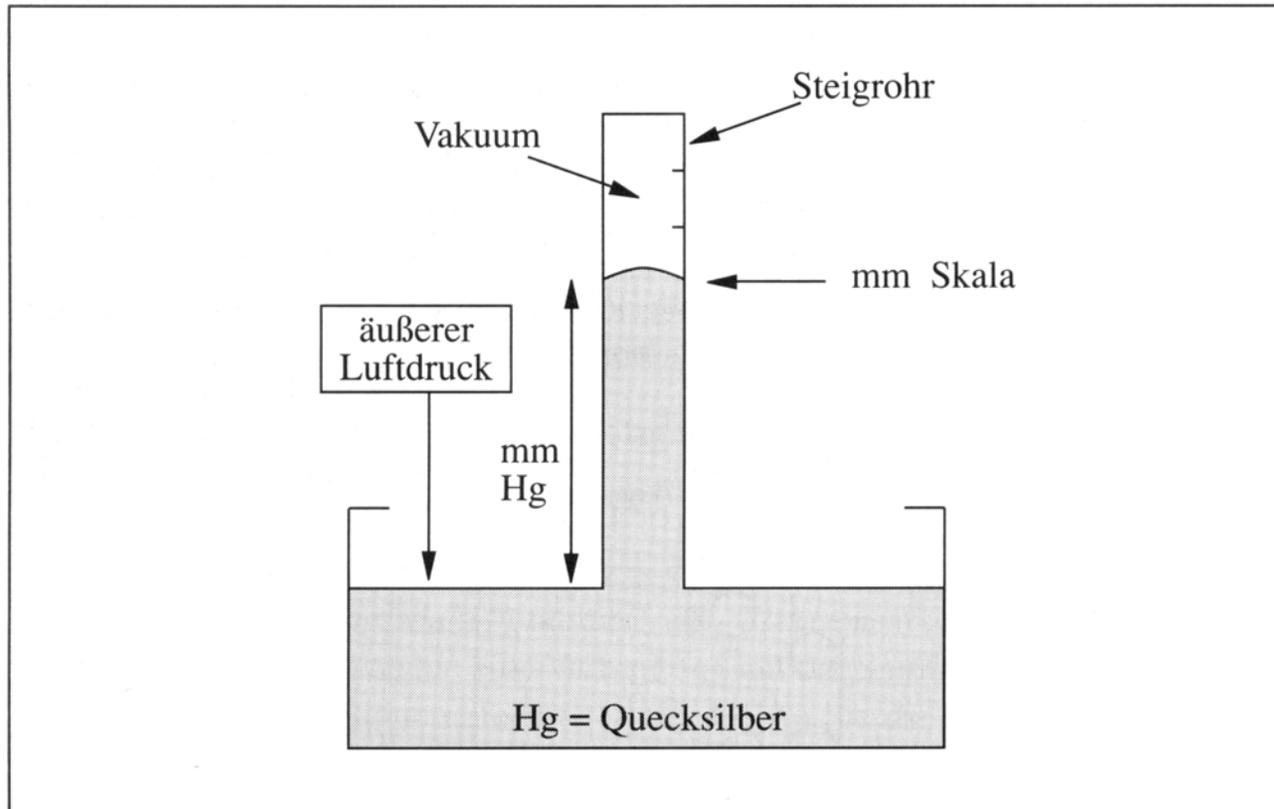
Kinetische Energie und Ordnung bei den drei Aggregatzuständen

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m \cdot v^2 \quad v^2 \sim \frac{T}{m}$$

m - Masse der Teilchen;

v - Geschwindigkeit

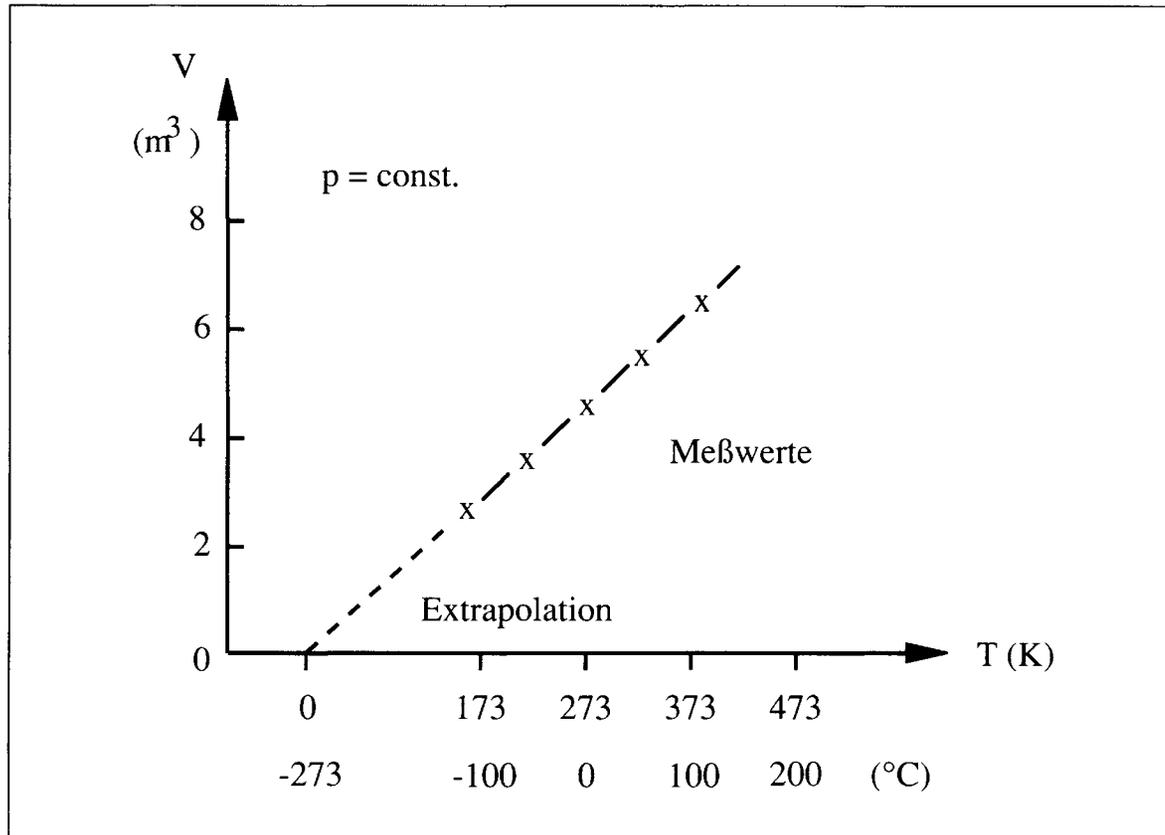
Druck und Druckmessung von Gasen: z.B. H₂, O₂, N₂, CO₂, CO, Edelgase



Quecksilber-Manometer

760 mm Hg = 760 Torr = 1 atm = 1.013 bar = 1013 Hektopascal

$10^5 \text{ Pa} = 1 \text{ bar}$



V, T-Diagramm für ein ideales Gas

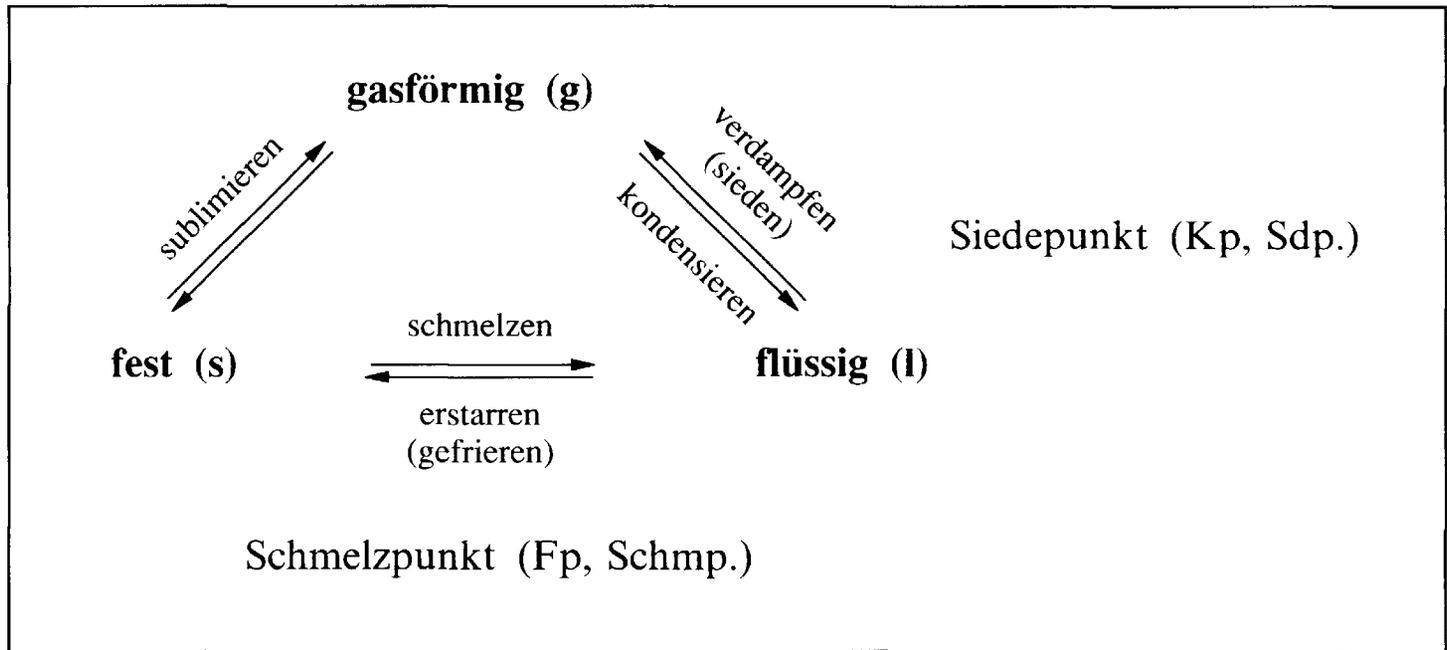
$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

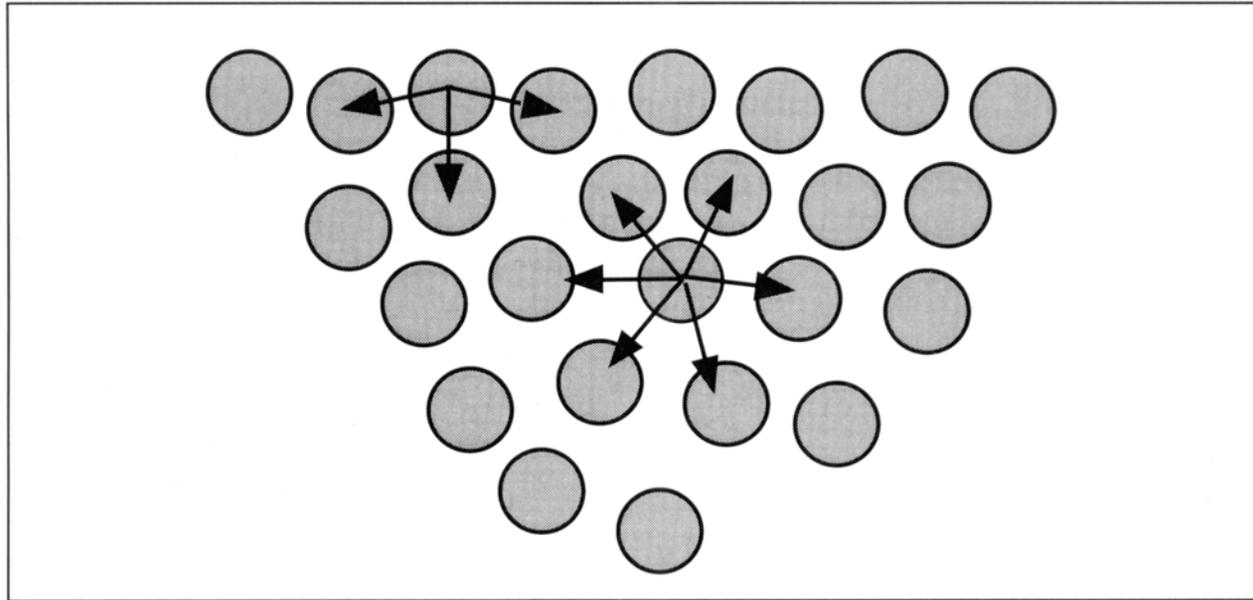
p = Druck (in Pa = Nm^{-1}), V = Volumen (in m^3), n = Stoffmenge (in mol),
 R = allgemeine Gaskonstante ($8.31 \text{ Jmol}^{-1} \text{ K}^{-1}$), T = Temperatur (in K)

$n = 1 \text{ mol}$: Molvolumen bei $0^{\circ}\text{C} \equiv 273 \text{ K}$ und $760 \text{ Torr} \equiv 1.013 \cdot 10^5 \text{ Pa}$:

$$V = 8.31 \cdot 273 / 1.013 \cdot 10^5 = 0.0224 \text{ m}^3 \equiv 22.4 \text{ l} \Rightarrow 6 \cdot 10^{23} \text{ Atome oder Moleküle}$$

Phasenumwandlungen



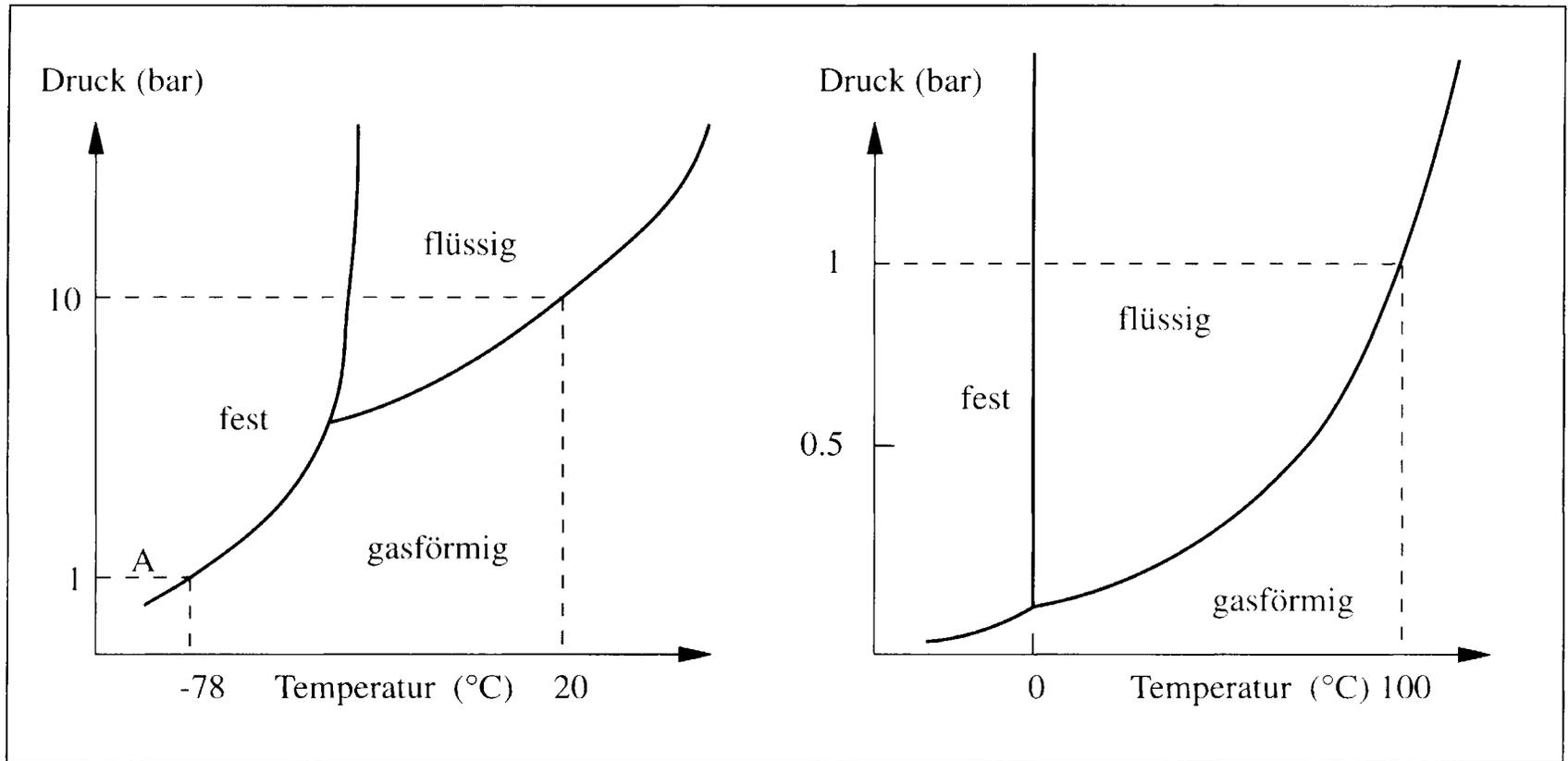


Schematische Darstellung der intermolekularen Anziehungskräfte im Innern und an der Oberfläche einer Flüssigkeit.

In der Flüssigkeit sind die intermolekularen Anziehungskräfte größer als die kinetische Energie der Teilchen.

Gegrümmte Oberfläche:

Oberflächenspannung: Maß für die nach innen gerichteten Kräfte an der Oberfläche einer Flüssigkeit.

Phasendiagramm von CO₂Phasendiagramm von H₂O**Kritische Punkt:**

$$T_{\text{krit.}} = 31.3^{\circ}\text{C}$$

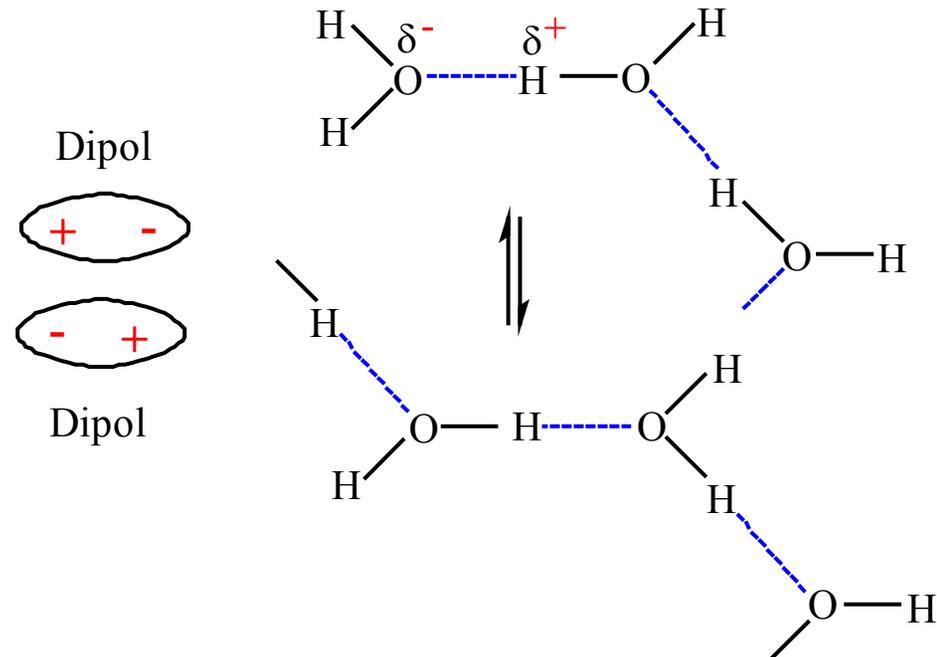
$$p_{\text{krit.}} = 73 \text{ atm.}$$

} oberhalb dieses kritischen Punktes \Rightarrow überkritisches CO₂

Zwischenmolekulare Kräfte

	Na⁺Cl⁻	
Schmp.	801 °C	Bei ionischen Verbindungen müssen beim Schmelzen und Sieden die
Sdp.	1413 °C	Coulombschen Anziehungskräfte überwunden werden ⇒ hoher Schmp. , hoher Sdp.
	H₂O (Wasser)	
	0 °C	Ungeladene polare Moleküle werden durch Dipol-Dipol-Wechselwirkungen
	100 °C	zusammengehalten ⇒ schwächere Anziehungskräfte als bei den ionischen
		Verbindungen: niedrigere Schmelz- und Siedepunkte .
	CH₄ (Methan)	
	-183.0 °C	Unpolare Moleküle werden durch van-der-Waals-Wechselwirkungen
	-161.5 °C	(induzierte Dipol-Dipol-Wechselwirkungen) zusammengehalten
		⇒ schwächere Anziehungskräfte als bei den polaren Molekülen:
		noch niedrigere Schmelz- und Siedepunkte .

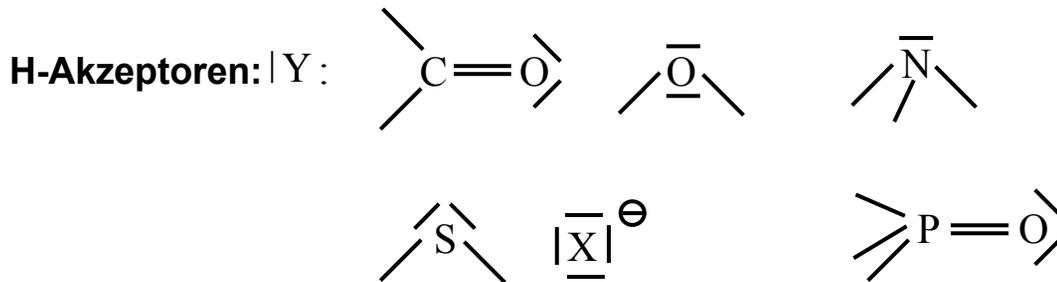
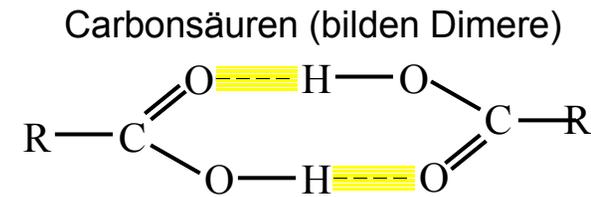
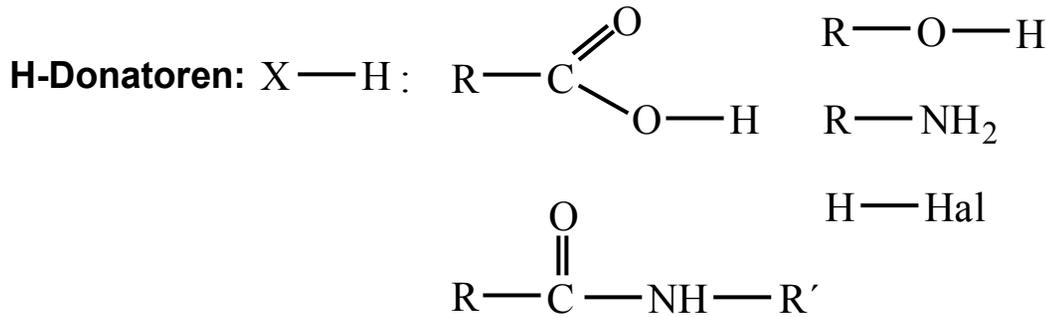
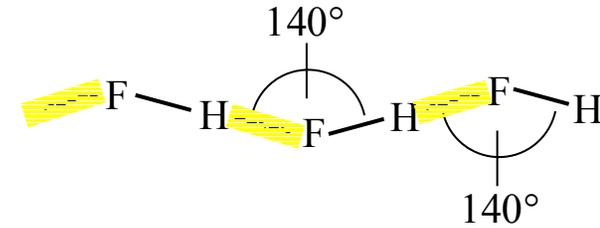
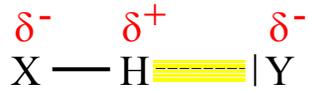
Wasserstoffbrücken-Bindung (Dipol-Dipol-Wechselwirkung)



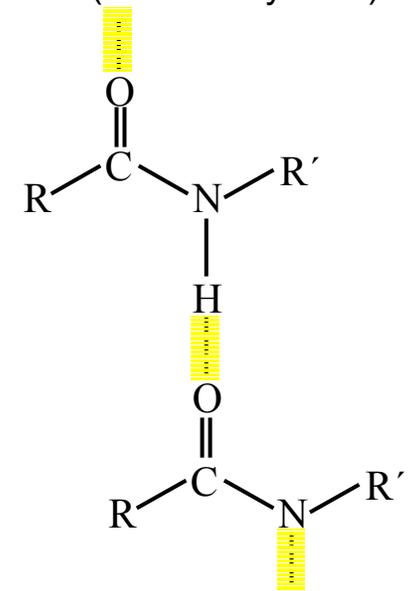
Siedepunkte von assoziierten und nicht-assozierten Molekülen Folie087

	H-F	HCl		H₂O	H₂S		H₃N	H₃P
Sdp.[°C]	+19.5	-84.9		+100.0	-60.7		-33.4	-87.4

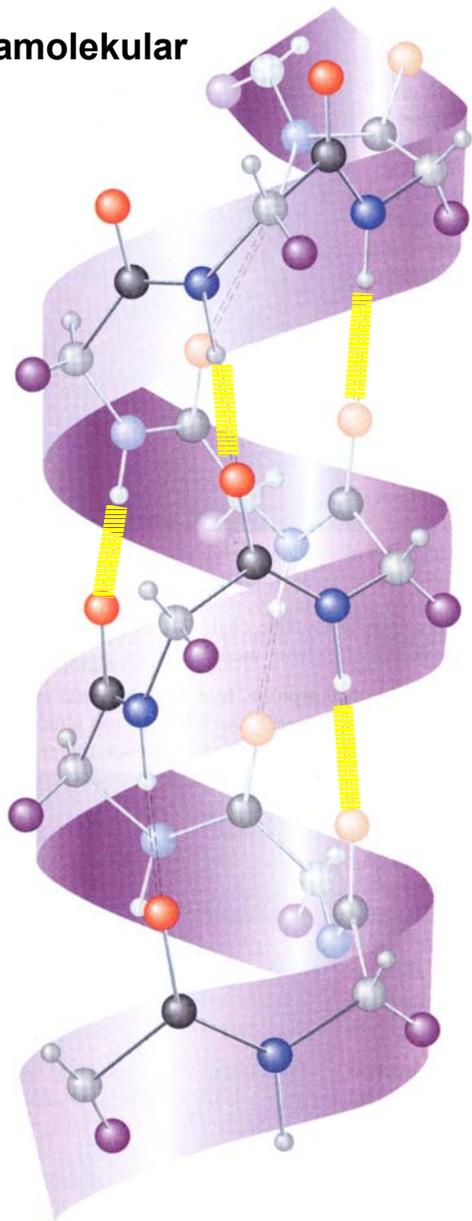
allgemein:



Amide (bilden Polymere)

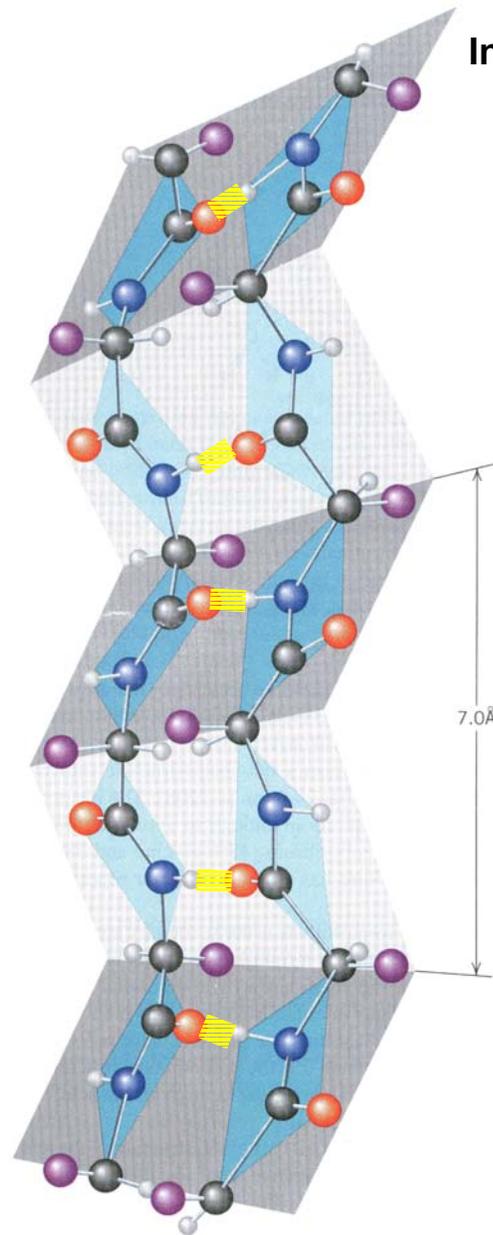


Intramolekular



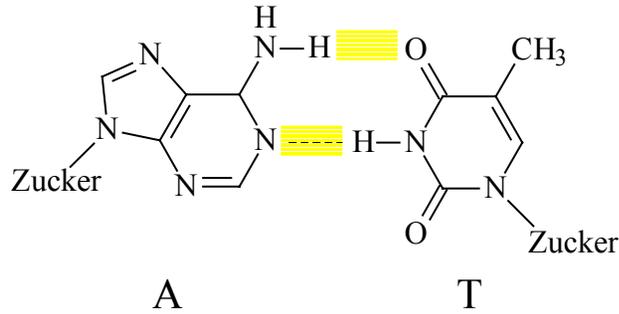
α -Helix

Intermolekular

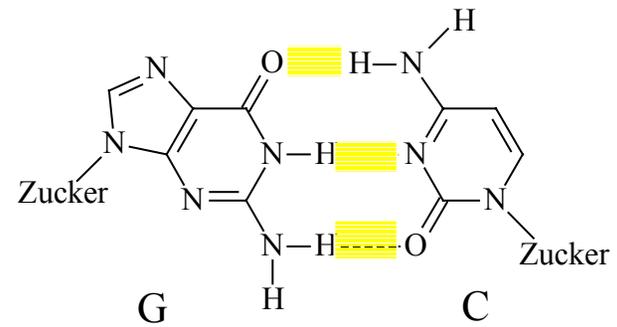


Faltblattstruktur

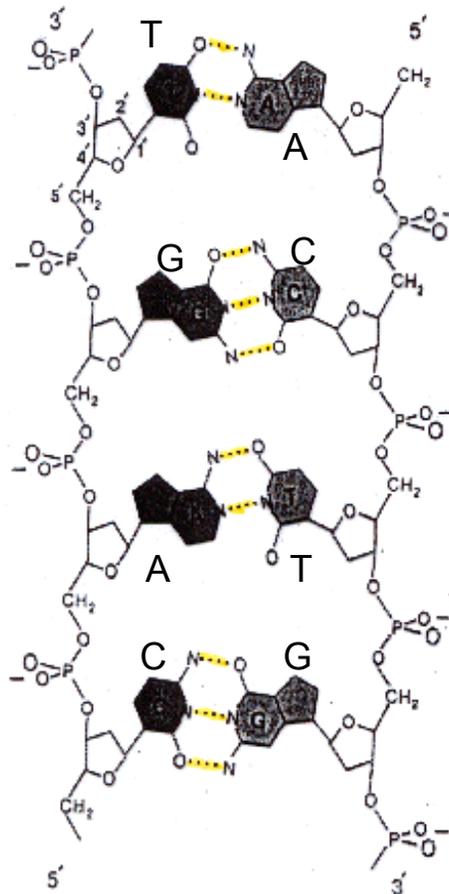
Basenpaare der DNA (Desoxyribonucleinsäure)



Adenin-Thymin-Bindung (A - T)

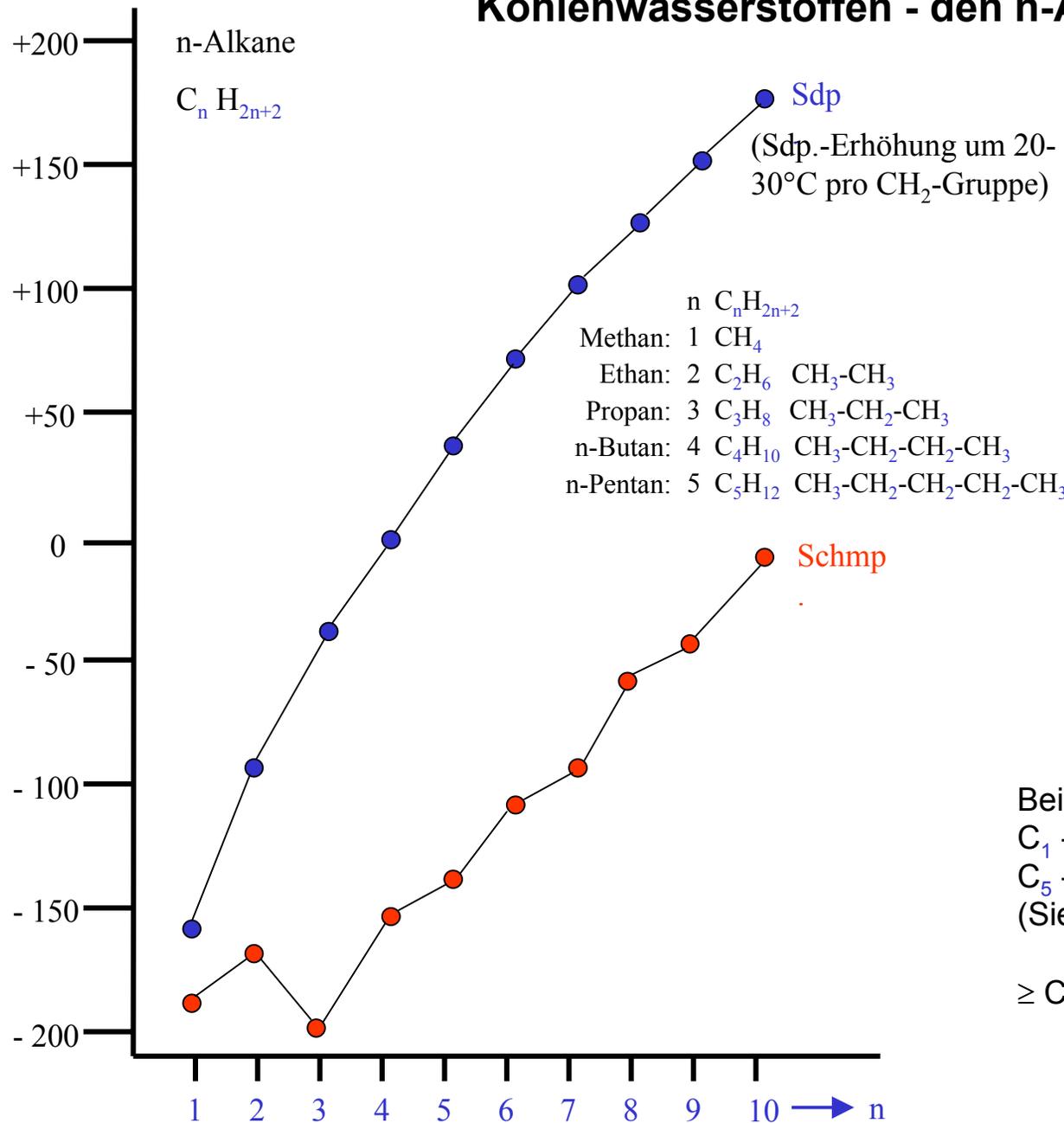


Guanin-Cytosin-Bindung (G - C)



Die wechselseitigen Wasserstoffbrückenbindungen sind für die doppelsträngige DNA-Struktur verantwortlich. (die H-Atome sind nicht eingezeichnet)

Van-der Waals-Wechselwirkungen bei unpolaren Kohlenwasserstoffen - den n-Alkanen



Bei 25°C n-Alkane:

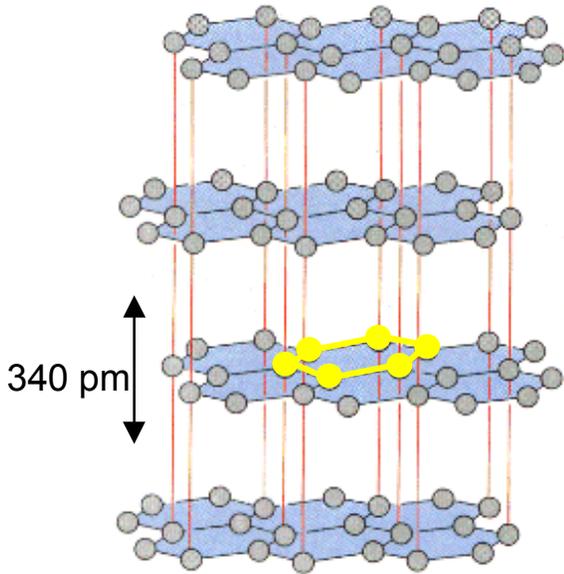
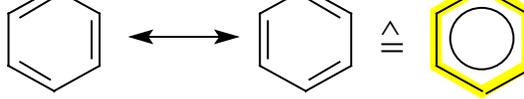
$C_1 - C_4$ gasförmig

$C_5 - C_{17}$ flüssig

(Siedebereich: +36°C n-Pentan bis +292°C n-Heptadecan)

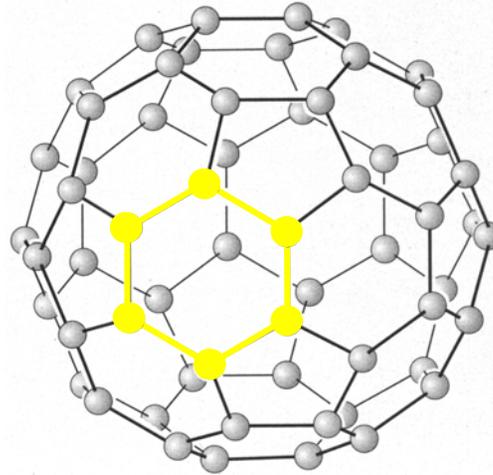
$\geq C_{18}$ kristallin

Benzol

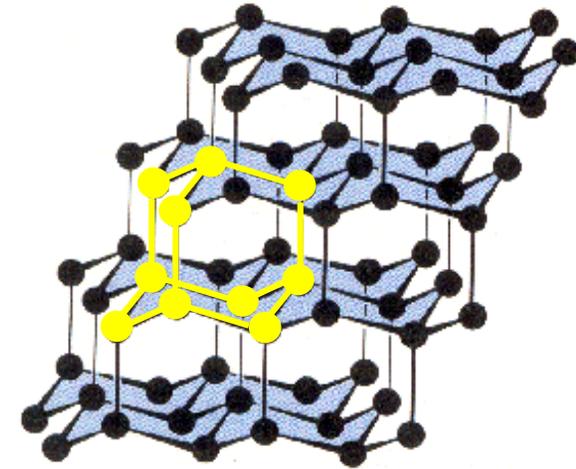


Graphit-Kristall

kristallisiert in Schichten,
zwischen den Schichten nur
schwache Wechselwirkungen

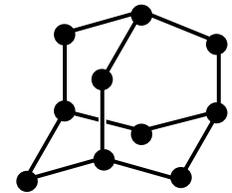


Anordnung der Atome im
Buckminsterfulleren-Molekül C₆₀



Diamant

Makromolekül wird durch
starke C-C-Einfachbindungen
zusammengehalten.



Adamantan

	Eigenschaften	Verwendung
Graphit	sehr weich, schwarz, undurchsichtig, leitfähig	Schmiermittel, Elektroden, Bleistiftminen
Diamant	sehr hart, farblos, stark lichtbrechend, nicht leitfähig	Zum Bohren, Schneiden und Schleifen; Achslager; Schmuck (in geschliffener Form)

Ein Stoffsystem, das in einer Phase (gasförmig, flüssig, fest) vorliegt, bezeichnet man als **homogen**.

Beispiele:

a) Reinstoffe in einer Phase

1 Ballon gefüllt mit O₂ -Gas

1 Glas gefüllt mit Wasser (H₂O (fl.))

1 Goldbarren (Au (s))

b) Stoffmischungen in einer Phase

Atemluft ⇒ Gemisch von Gasen: 78% N₂, 21% O₂, 0.036% CO₂

+ Edelgase und Wasserdampf (Luftfeuchtigkeit)

Lösungen: z.B. Salzlösungen (l): Na⁺ Cl⁻ in H₂O (Kochsalzlösung)

Legierungen: z.B. Messing (s): 56-57% Cu + 44-33% Zn

Lösungen

a) **Echte Lösungen** ⇒ die Moleküle oder Ionen liegen **molekular dispers** vor (gelöster Stoff ≤ 3nm)

b) **Kolloidale Lösungen** ⇒ Lösung von **Makromolekülen** der Größe 3-200 nm (Kolloid-dispers)

c) **Lösungen von noch größeren Teilchen**, die man unter dem **Lichtmikroskop** sichtbar machen kann, gehören zu den **heterogenen Systemen**.

Heterogen Systeme

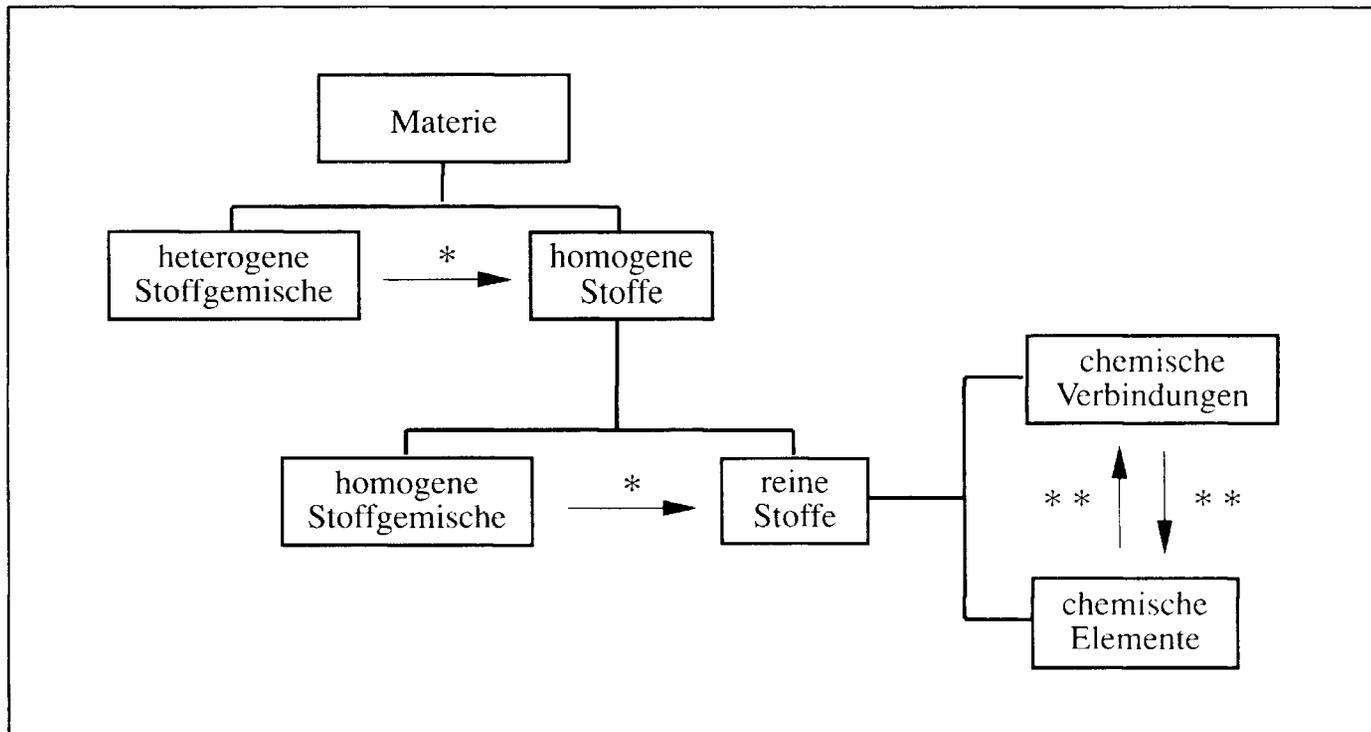
enthalten zwei oder mehrere nicht miteinander mischbare homogene Systeme.

Beispiel: Eis / Wasser (zwei reine Stoffe)

Heterogene Systeme

Aggregatzustand	Bezeichnung	Beispiel
fest/fest	Gemenge, Konglomerat	Granit, Aspirin-Tablette
fest/flüssig	Aufschlämmung, Suspension	erdtrübes Wasser, Kalkmilch
flüssig/flüssig	Emulsion	Creme, Milch
fest/gasförmig	Aerosol	Staub, Rauch
flüssig/gasförmig	Aerosol	Nebel, Schaum

Einteilung der Stoffe



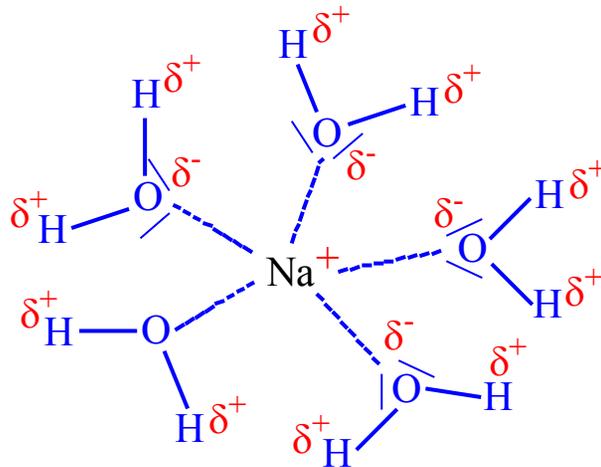
* = Trennung durch physikalische Methoden; ** = Überführung durch Stoffumwandlung (chemische Methode)

Löslichkeit

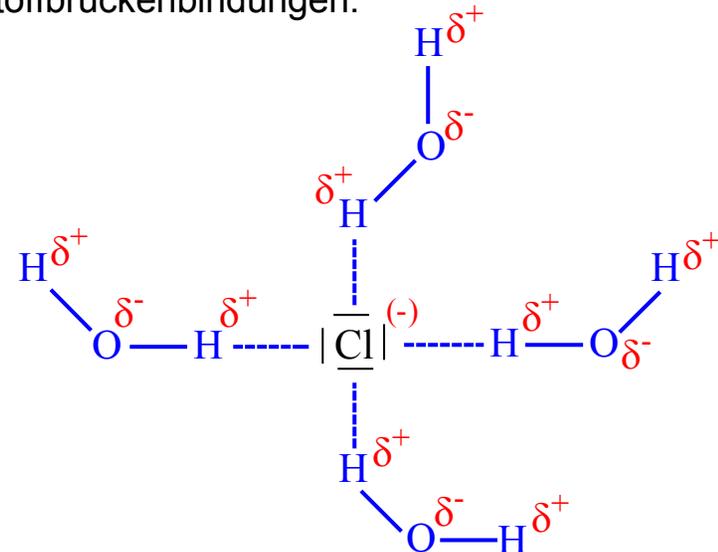
358 g Kochsalz (Na^+Cl^-) in 1 l H_2O (Sättigungskonzentration)
 ca. 80 g Diethylether ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O-CH}_2\text{-CH}_3$) in 1 l H_2O
 ca. 80 g 1-Butanol ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-O-H}$) in 1 l H_2O
 Ethanol ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$) völlig mischbar mit H_2O

	H_2O	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$	CCl_4	CHCl_3	
Dichte d:	1.0	0.71	1.6	1.5	g/Mol

Verantwortlich für die Löslichkeit sind hier Ion-Dipol- oder Dipol-Dipol-Wechselwirkungen sowie Wasserstoffbrückenbindungen.



Hydrat-(Solvat)-Hülle



Wasserstoffbrückenbindung

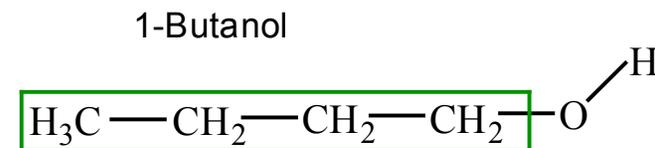
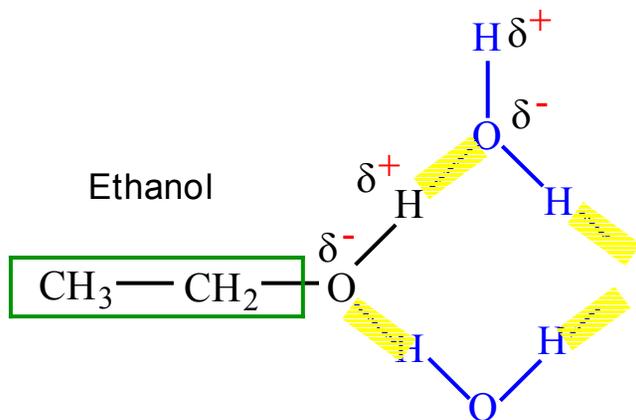
Gleiches löst sich in Gleichem

polar / unpolar

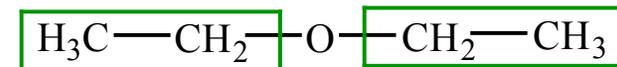
hydrophil / hydrophob

lipophob / lipophil

(gr. Hydror - Wasser; phil - liebend; phobie - Angst) (lipos - Fett)

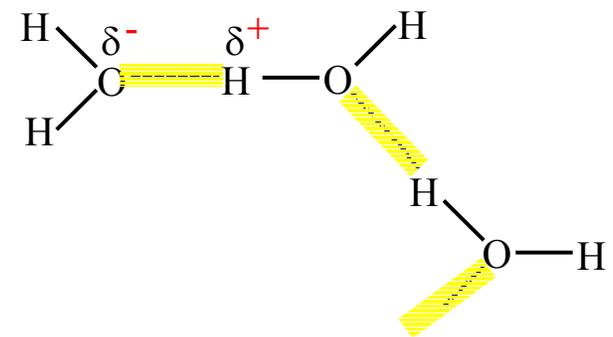
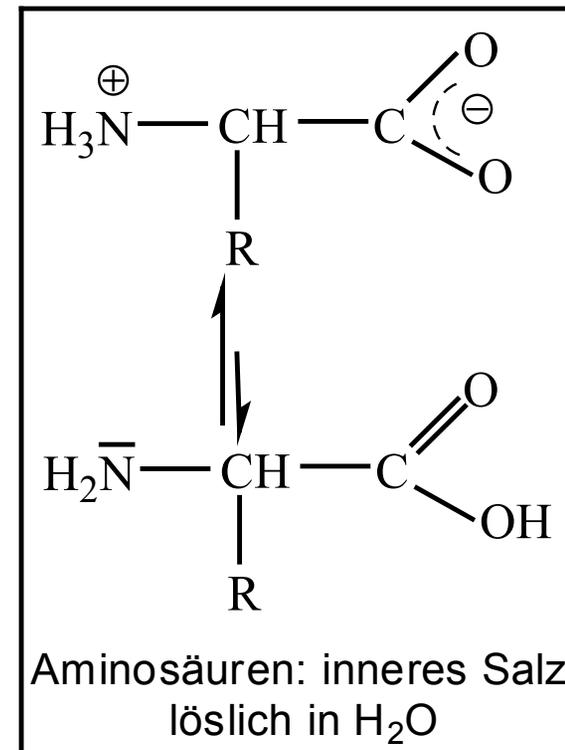


vgl. löslich wie Diethylether

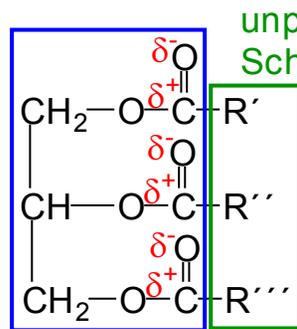


Weniger löslich in H_2O als Ethanol
wegen der größeren unpolaren Reste.

Unpolare Reste können nicht solvatisiert werden, da die Wechselwirkung zwischen den polaren Solvensmolekülen untereinander stärker ist, als zwischen dem unpolaren Alkylrest und dem polaren Solvensmolekül.



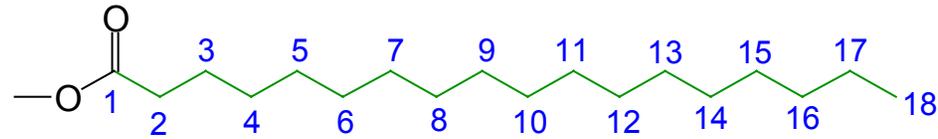
Fette (Lipide)



unpolarer

Schwanz: R', R'', R''' unpolare lange Kohlenwasserstoffketten zwischen C₁₁ und C₂₈

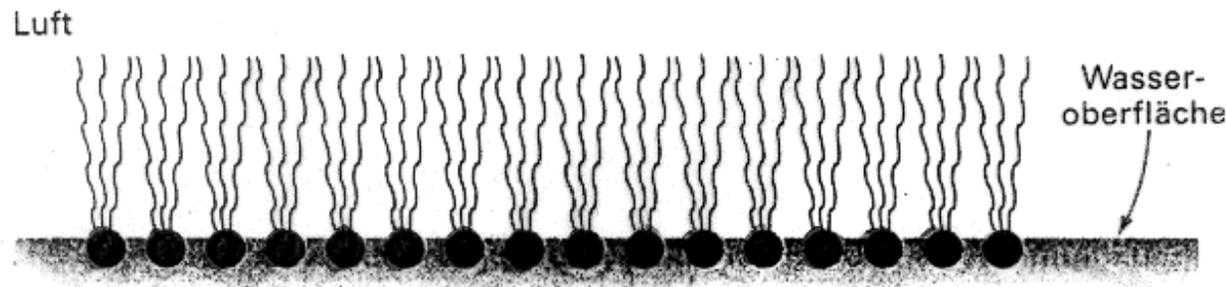
Beispiel: Stearinsäure-Rest



mäßig polarer Kopf



Kalottenmodell des
Triölsäureesters des Glycerins



Monomolekulare Schicht von Ölmolekülen
an einer Wasser-Luft-Grenzfläche