

Molekülstruktur und Stoffeigenschaften

Orbital

Der Raum, in dem sich ein Elektron mit größtmöglicher Wahrscheinlichkeit aufhält.

Elektronenpaarabstoßungsmodell

Dieses Modell ermöglicht eine Vorhersage der räumlichen Struktur eines Moleküls.

Regel 1: Jedes Elektronenpaar (bindend oder nichtbindend) entspricht einem Orbital (=Elektronenwolke).

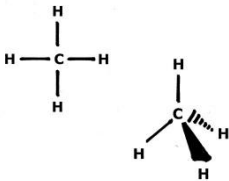
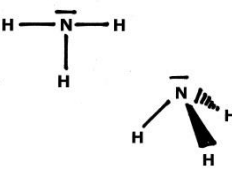
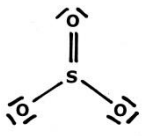
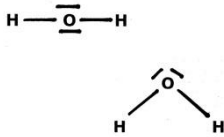
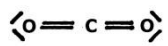
Da diese Orbitale somit alle eine negative Ladung besitzen, stoßen sie sich gegenseitig ab.

Räumlich nehmen sie daher den größtmöglichen Abstand voneinander ein.

Regel 2: Nichtbindende Elektronenpaare benötigen mehr Raum als bindende.

Grund: Bindende Elektronenpaare werden von 2 Kernen, nichtbindende nur von einem Kern angezogen.

räumliche Grundstrukturen

tetraedrisch	pyramidal	trigonal-planar	gewinkelt	linear
CH ₄	NH ₃	SO ₃	H ₂ O	CO ₂
				
$\sphericalangle HCH \approx 109,5^\circ$	$\sphericalangle HNH \approx 107,3^\circ$	$\sphericalangle OSO = 120^\circ$	$\sphericalangle HOH \approx 104,5^\circ$	$\sphericalangle OCO = 180^\circ$

Elektronegativität (EN)

Sie ist ein Maß für die Fähigkeit eines Atoms, Elektronen in einer Atombindung (= kovalente Bindung = Elektronenpaarbindung) an sich zu ziehen.

Das elektronegativste Atom ist das Fluor-Atom.

Faustregel: Die EN steigt von links nach rechts und von unten nach oben im Periodensystem.


polare / unpolare Atombindung

Betrachtet man die Elektronegativitätsdifferenz (ΔEN) zweier durch Atombindung gebundener Atome, so gibt es zwei Möglichkeiten:

$\Delta EN = 0 \Rightarrow$ unpolare Atombindung; die bindenden Elektronen sind gleichmäßig verteilt.

Beispiel: H–H

$\Delta EN \neq 0 \Rightarrow$ polare Atombindung; der elektronegativere Partner zieht die bindenden Elektronen mehr zu sich.

Beispiel: H–F : Die Ungleichverteilung wird gern durch einen "Keil" symbolisiert: 

EN(H)=2,20; EN(F)=3,98;

Dipol

Durch polare Atombindungen in einem Molekül kann sich insgesamt eine Ungleichverteilung der Ladungen ergeben und damit ein positives und ein negatives Ende.

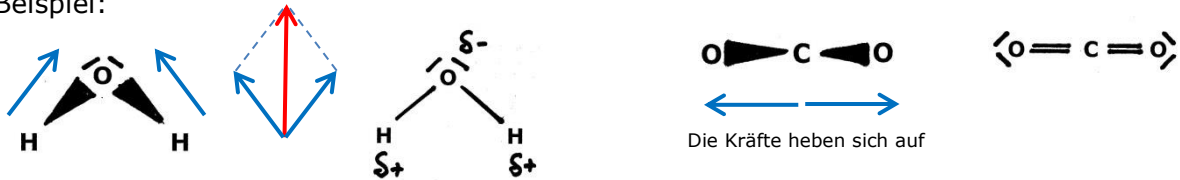
Das Molekül besitzt Partialladungen (=Teilladungen).

Symbol: $\delta +$ (*delta plus*); $\delta -$ (*delta minus*)

Durch Symmetrie kann trotz polarer Atombindung ein unpolares Molekül vorliegen.

Grund: Kräfte sind vektorielle Größen \Rightarrow Addition im "Kräfteparallelogramm"

Beispiel:



$\text{H}_2\text{O} = \text{Dipol}$
 $\text{EN}(\text{H})=2,20; \text{EN}(\text{O})=3,44;$

$\text{CO}_2 = \text{kein Dipol}$
 $\text{EN}(\text{C})=2,55; \text{EN}(\text{O})=3,44;$

inter- und intramolekulare Bindungskräfte

inter = zwischen		intra = innerhalb
van-der-Waals-Kräfte		polare Atombindung
Dipol-Dipol-Wechselwirkungen		unpolare Atombindung
Wasserstoffbrücken		

Van-der-Waals-Kräfte

- zwischen unpolaren Molekülen
- Die regellose Bewegung der Elektronen in den Orbitalen führt immer wieder zu kurzzeitiger, unsymmetrischer Ladungsverteilung. \Rightarrow spontaner Dipol
- Die spontanen Dipole beeinflussen die Elektronenverteilung der Nachbarmoleküle und begünstigen dort unsymmetrische Ladungsverteilungen. \Rightarrow induzierter Dipol
- Die Anziehungskräfte sind nur für winzige Zeitspannen vorhanden, treten an verschiedenen Stellen aber immer wieder auf. \Rightarrow Van-der-Waals-Kräfte wirken umso besser, je größer die gemeinsame Oberfläche der Moleküle ist.
- Die schwächsten intermolekularen Bindungskräfte.

Dipol-Dipol-Wechselwirkungen

- zwischen polaren Molekülen
- permanenter Dipol \Rightarrow gegenseitige Anziehung
- stärkere Bindungskräfte als die van-der-Waals-Kräfte

Wasserstoffbrückenbindungen

- zwischen Molekülen, in denen H-Atome an N-, O- oder F-Atome gebunden sind.
- Die Elektronegativitätsdifferenz in den Bindungen N-H, O-H und F-H ist besonders groß. \Rightarrow es liegen besonders starke (permanente) Dipole vor
- Wasserstoffbrückenbindungen sind besonders starke Dipol-Dipol-Wechselwirkungen.

Saure, basische und neutrale Lösungen

Säure-Base-Indikatoren

Mit Säure-Base-Indikatoren kann man anhand der Farbe saure, basische und neutrale Lösungen unterscheiden.

Universalindikatoren erlauben sogar Aussagen darüber, wie stark sauer oder basisch eine Lösung ist (als Faustregel gilt: orange→rot: sauer; grün→blau: basisch).

Säure / saure Lösung

Säure = Stoff, der Protonen abgeben kann (Protonendonator)

saure Lösung = Lösung einer Säure in Wasser;

sie enthält stets Oxonium-Ionen (H_3O^+ -Ionen)

Beispiel: $HCl_{(g)} + H_2O_{(l)} \rightarrow H_3O^+_{(aq)} + Cl^-_{(aq)}$

$HCl_{(g)}$ = Säure: Chlorwasserstoff ; $H_3O^+_{(aq)} + Cl^-_{(aq)} = HCl_{(aq)}$ = saure Lösung

Wichtige Säuren und ihre Anionen

Name	Formel	Anion	Formel
Salzsäure	HCl	Chlorid-Ion	Cl^-
Kohlensäure	H_2CO_3	Hydrogencarbonat-Ion	HCO_3^-
		Carbonat-Ion	CO_3^{2-}
Salpetersäure	HNO_3	Nitrat-Ion	NO_3^-
Salpetrige Säure	HNO_2	Nitrit-Ion	NO_2^-
Schwefelsäure	H_2SO_4	Hydrogensulfat-Ion	HSO_4^-
		Sulfat-Ion	SO_4^{2-}
Schweflige Säure	H_2SO_3	Hydrogensulfit-Ion	HSO_3^-
		Sulfit-Ion	SO_3^{2-}
Phosphorsäure	H_3PO_4	Dihydrogenphosphat-Ion	$H_2PO_4^-$
		Hydrogenphosphat-Ion	HPO_4^{2-}
		Phosphat-Ion	PO_4^{3-}
Phosphorige Säure	H_3PO_3	Dihydrogenphosphit-Ion	$H_2PO_3^-$
		Hydrogenphosphit-Ion	HPO_3^{2-}
		Phosphit-Ion	PO_3^{3-}

Base / alkalische Lösung

Base = Stoff, der Protonen aufnehmen kann (Protonenakzeptor)

basische Lösung = Lösung einer Base in Wasser;

sie enthält stets Hydroxid-Ionen (OH^- -Ionen)

Beispiel: $NH_3_{(g)} + H_2O_{(l)} \rightarrow NH_4^+_{(aq)} + OH^-_{(aq)}$

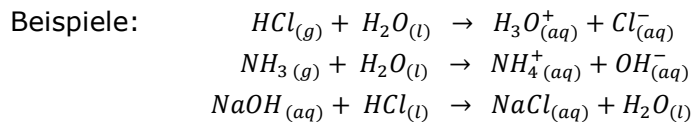
$NH_3_{(g)}$ = Base: Ammoniak ; $NH_4^+_{(aq)} + OH^-_{(aq)} = NH_3_{(aq)}$ = basische Lösung

wichtige Basen

Name	Formel	Kation	Formel
Ammoniak	NH_3	Ammonium-Ion	NH_4^+
Natronlauge	NaOH		
Kalilauge	KOH		
Kalkwasser	$Ca(OH)_2$		
Barytwasser	$Ba(OH)_2$		

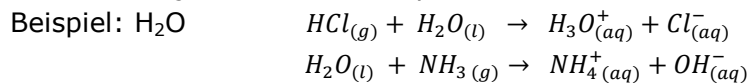
Protolyse = Säure-Base-Reaktion

= Reaktion mit Protonenübergang

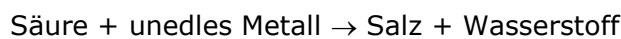
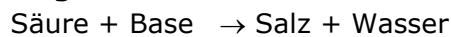


Ampholyt

= Stoff, der je nach Reaktionspartner als Säure oder Base reagieren kann.



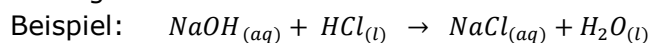
Salzbildung



Neutralisation

= Aufhebung der Basenwirkung (Säurewirkung) durch Säurezusatz (Basenzusatz).

= Reaktion der Oxonium-Ionen einer sauren Lösung mit den Hydroxid-Ionen einer basischen Lösung zu Wasser.



Titration

= Neutralisation einer Säure bzw. Base zur Ermittlung ihrer Konzentration

Äquivalenzpunkt

= Der Punkt einer Titration, an dem so viele H_3O^+ -Ionen (OH^- -Ionen) zugesetzt wurden, wie OH^- -Ionen (H_3O^+ -Ionen) in der Lösung verfügbar waren.

Stoffmengenkonzentration

des Stoffes X: $c(X) = \frac{n(X)}{V(\text{Lösung})} \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}} \right]$

pH-Wert

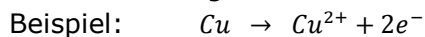
= Maß für die Konzentration der Oxonium-Ionen in einer Lösung.

pH: **0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14**
sauer **neutral** **basisch**

Elektronenübergänge

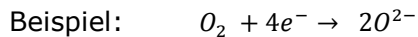
Oxidation

=Elektronenabgabe



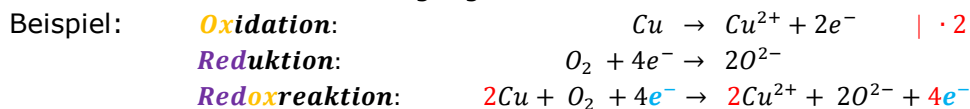
Reduktion

=Elektronenaufnahme



Redoxreaktion

=Reaktion mit Elektronenübergang



Die Anzahl der Elektronen auf der Edukt- und Produktseite ist durch das Multiplizieren der Oxidations-Teilgleichung gleich.
⇒ Man kürzt sie heraus!



Oxidations- und Reduktionsmittel

Oxidationsmittel : oxidiert den Reaktionspartner und wird selbst reduziert

Reduktionsmittel : reduziert den Reaktionspartner und wird selbst oxidiert



Oxidationszahl

Ändern sich bei einer chemischen Reaktion Oxidationszahlen von beteiligten Atomen, so liegt eine Redoxreaktion vor.

- Erhöhung der Oxidationszahl ⇒ Oxidation
- Erniedrigung der Oxidationszahl ⇒ Reduktion

Regeln zur Bestimmung von Oxidationszahlen (OZ)

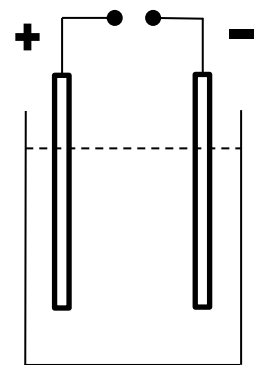
- (1) Atome von Elementen: OZ = 0
- (2) Atom-Ionen: OZ = Ladung des Ions
- (3) Moleküle / Molekül-Ionen / Salze:
 - a) Metallatome: OZ stets positiv
 - b) Fluor: OZ = -I
 - c) Wasserstoff: OZ = +I
 - d) Sauerstoff: OZ = -II (Ausnahme: In H₂O₂ hat Sauerstoff die OZ = -I)
 - e) Die Summe der OZ = Ladung des Molekül-Ions
 - f) Die Summe der OZ = 0 (Moleküle/ Salze)

Regeln zum Aufstellen von Redoxreaktionen

- (1) Bestimmen der OZ der beteiligten Stoffe! \Rightarrow Oxidation, Reduktion
- (2) Oxidations-Teilgleichung: "Ox: Edukt \rightarrow Produkt"
- (3) Gleiche Anzahl der Atome, die die OZ wechseln, durch passenden Koeffizient herstellen!
- (4) Anzahl der abgegebenen Elektronen aus den OZ bestimmen und dabei die Anzahl der Atome beachten!
- (5) Ausgleich der realen Ladungen mit H_3O^+ (saure Lösung) bzw. OH^- (basische Lösung)!
- (6) Stoffausgleich mit H_2O !
- (7) Analoges Aufstellen der Reduktions-Teilgleichung!
- (8) Multiplikation der Teilgleichungen so, dass die Zahl der Elektronen je gleich ist (kgV)!
- (9) Addition der Teilgleichungen und Vereinfachung!

Elektrolyse

- Analyse mit Hilfe von elektrischem Strom
- Erzwungene Redoxreaktion durch Verwendung von Gleichstrom
- Zwei Elektroden tauchen dazu in eine Lösung, die Ionen enthält (Elektrolyt-Lösung).
- Die Kationen (positiv geladene Ionen) wandern zur Kathode (negative Elektrode), nehmen dort Elektronen auf und werden so entladen.
- Die Anionen (negativ geladene Ionen) wandern zur Anode (positive Elektrode), geben dort Elektronen ab und werden so entladen.
- Durch Elektrolyse lassen sich viele Elemente gewinnen, z.B. Metalle (Cu, Na, ...) oder Gase wie Wasserstoff und Sauerstoff.



Chemie der Kohlenwasserstoffe

Alkane

Gesättigte, kettenförmige Kohlenwasserstoffe

gesättigt = nur Einfachbindungen

kettenförmig = keine Ringe

Kohlenwasserstoff = nur C- und H-Atome

Summenformel der Alkane : C_nH_{2n+2} ($n \in \mathbb{N}$)

Alle Alkane erhalten im Namen die **Endung "an"**.

homologe Reihe

Eine Aufreihe organischer Verbindungen, bei denen sich zwei aufeinanderfolgende Verbindungen um genau eine CH_2 -Gruppe unterscheiden.

homologe Reihe der Alkane – Nomenklatur

Name	Formel	Name	Formel
Methan	CH_4	Hexan	C_6H_{14}
Ethan	C_2H_6	Heptan	C_7H_{16}
Propan	C_3H_8	Octan	C_8H_{18}
Butan	C_4H_{10}	Nonan	C_9H_{20}
Pentan	C_5H_{12}	Decan	$C_{10}H_{22}$

Die ersten 4 Namen sind historisch bedingt, also sog. Trivialnamen.

Alle weiteren Namen werden systematisch gebildet: **griech./lateinisches Zahlwort + Endung "an"**

Isomerie

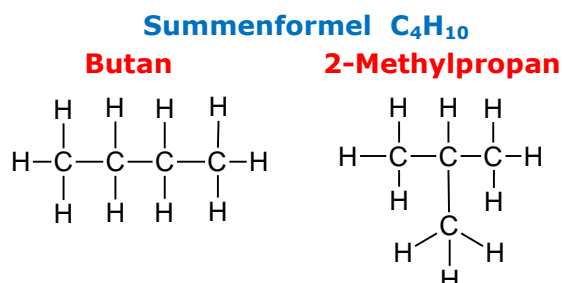
Isomere Verbindungen weisen bei gleicher Summenformel unterschiedliche physikalische und/oder chemische Eigenschaften auf.

Konstitution / Konstitutionsisomerie

Konstitution ist die Art der Verknüpfung von Atomen untereinander durch chemische Bindung im Molekülverband ohne besondere Berücksichtigung der räumlichen Anordnung.

Ein Konstitutionsisomeres (=Strukturisomeres) entsteht, wenn man die Atome eines Moleküls über andere Bindungen miteinander verknüpft.

Beispiel:



Strukturformel / Halbstrukturformel / Skelettformel

Strukturformel = Valenzstrichformel = Lewisformel

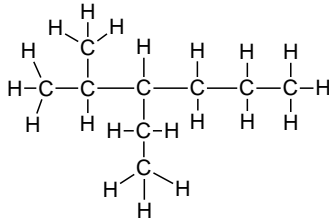
Halbstrukturformel = Verknüpfung der Gruppen

Skelettformel = Alleinige Darstellung der Bindungen (Enden und Ecken = C-Atome)

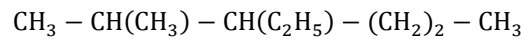
Beispiel:

3-Ethyl-2-methylhexan

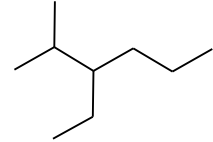
Strukturformel



Halbstrukturformel

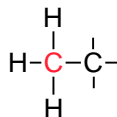


Skelettformel

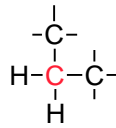


primäre, sekundäre, tertiäre, quartäre C-Atome

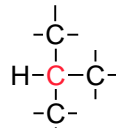
Je nach der Anzahl der C-Atome, die ein C-Atom unmittelbar gebunden hat, wird es wie folgt bezeichnet:



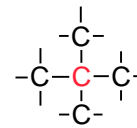
primär



sekundär



tertiär

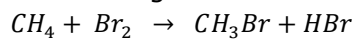


quartär

Substitution

Substitution = Austausch einzelner Atome oder Atomgruppen im Molekül durch (gleichwertige) Atome oder Atomgruppen.

Beispiel: Bromierung von Methan



Alkene / Alkine

Ungesättigte, kettenförmige Kohlenwasserstoffe

ungesättigt = enthält Mehrfachbindungen

kettenförmig = keine Ringe

Kohlenwasserstoff = nur C- und H-Atome

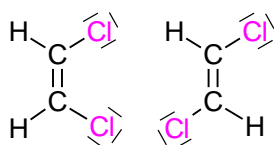
	Namenendung	Summenformel bei 1 Mehrfachbindung
Alken	"en"	1 Doppelbindung $\Rightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n}$ ($n \in \mathbb{N}$)
Alkin	"in"	1 Dreifachbindung $\Rightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n-2}$ ($n \in \mathbb{N}$)

Konfiguration

Beschreibung der räumlichen Anordnung der Atome im Molekül ohne Berücksichtigung von Rotation um Bindungen.

Konfigurationsisomere besitzen die gleiche Konstitution!

Beispiel: **Z/E-Isomere**



①

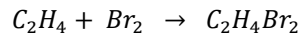
②

① = Z-1,2-Dichlorethen ② = E-1,2-Dichlorethen

Addition

Addition = Anlagerung von Atomen oder Atomgruppen im Molekül an Mehrfachbindungen unter Aufhebung von π -Bindungen.

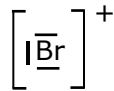
Beispiel: Addition von Brom an Ethen



Elektrophil

Ein Elektrophil ist ein angreifendes Teilchen mit Elektronenmangel.

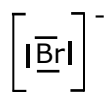
Beispiel:



Nukleophil

Ein Nukleophil ist ein angreifendes Teilchen mit Elektronenreichtum.

Beispiel:



Baeyer-Probe

Nachweisreaktion für ungesättigte Verbindungen (Existenz von Doppel- oder Dreifachbindungen).

Eine Probe der zu untersuchenden Substanz wird in sodaalkalische Kaliumpermanganat-Lösung gegeben.

Bei positivem Verlauf entfärbt sich die violette Kaliumpermanganatlösung und es entsteht ein brauner Niederschlag.

Bromwasserprobe

Nachweisreaktion für ungesättigte Verbindungen (Existenz von Doppel- oder Dreifachbindungen).

Eine Probe der zu untersuchenden Substanz wird in Bromwasser gegeben.

Bei positivem Verlauf wird das gelb-orange gefärbte Bromwasser entfärbt.

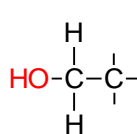
Alkohole – eine Stoffklasse für sich

Alkohol

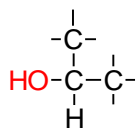
Ersetzt man in einem Kohlenwasserstoff formal mindestens ein H-Atom durch eine Hydroxyl-Gruppe (= OH-Gruppe), so erhält man einen Alkohol.

primäre, sekundäre, tertiäre Alkohole

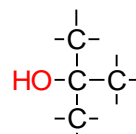
Wird an einem primären, sekundären bzw. tertiären C-Atom ein H-Atom durch eine OH-Gruppe ersetzt, so nennt man den resultierenden Alkohol



primär



sekundär

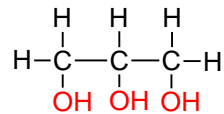


tertiär

mehrwertige Alkohole

Die Anzahl der OH-Gruppen, die ein Alkoholmolekül enthält, ist die Wertigkeit des Alkohols.

Beispiel: Ein Glycerinmolekül enthält **3 OH-Gruppen**.
⇒ Glycerin ist ein **3-wertiger Alkohol**.



Glycerin = Propan-1,2,3-triol

Erlenmeyerregel

Im Normalfall sind nie mehrere OH-Gruppen an einem C-Atom gebunden.

Oxidation der Alkohole

Oxidationsmittel:

KMnO₄ (Kaliumpermanganat) oder K₂Cr₂O₇ (Kaliumdichromat) je in saurer Lösung.

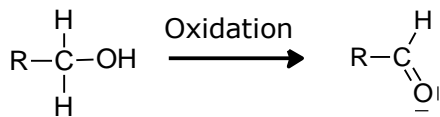
Alkohol	Oxidationsprodukt	Beobachtung beim Versuch	
		KMnO ₄	K ₂ Cr ₂ O ₇
primär	Aldehyd	Die violette Lösung wird entfärbt.	Die orange Lösung wird grün.
sekundär	Keton	Die violette Lösung wird entfärbt	Die orange Lösung wird grün.
tertiär	keine Reaktion	Keine Änderung	Keine Änderung

Oxidationsprodukte der Alkohole

Aldehyde

Aldehyde entstehen durch Oxidation primärer Alkohole.

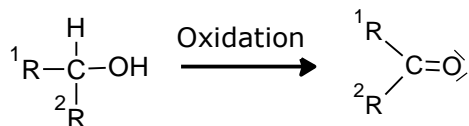
Sie besitzen die **funktionelle Gruppe CHO** (Aldehyd-Gruppe).



Ketone

Ketone entstehen durch Oxidation sekundärer Alkohole.

Sie besitzen die **funktionelle Gruppe CO** (Carbonyl-Gruppe).



Schiffsche Probe

Nachweisreaktion für Aldehyde.

Nur Vorprobe, da auch mit manchen anderen Stoffen positiv!

Mit Schiffs-Reagenz färbt sich die farblose Lösung rot-violett.

Silberspiegelprobe

Nachweisreaktion für Aldehyde.

Mit ammoniakalischer Silbernitrat-Lösung bildet sich beim Erwärmen ein Silberspiegel auf der Gefäßwand.

Fehling-Probe

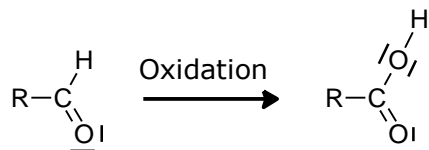
Nachweisreaktion für Aldehyde.

Mit der tiefblauen Fehling-Lösung bildet sich beim Erhitzen ein ziegelroter Niederschlag.

Carbonsäuren

Carbonsäuren entstehen durch Oxidation von Aldehyden.

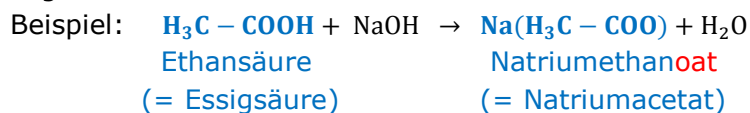
Sie besitzen die **funktionelle Gruppe COOH** (Carboxyl-Gruppe).



Salzbildung

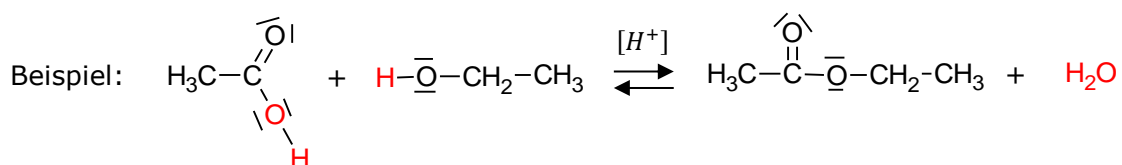
Die Salze erhalten die Endung "oat".

allg.: Säure + Base → Salz + Wasser



Esterbildung

allg.: Säure + Alkohol $\xrightleftharpoons{[H^+]}$ Ester + Wasser



Namengebung bei Estern

Allgemein	Beispiel
Name der Säure + Rest des Alkohols + "ester"	Ethansäure (=Essigsäure) + Methanol = Ethansäuremethylester = Essigsäuremethylester
Rest des Alkohols + Name des Säureanions	Methylethanoat = Methylacetat

chemisches Gleichgewicht

Haben sich bei einer chemischen Reaktion Produkte gebildet, so können sich diese im System treffen und wieder zu den Edukten zurückreagieren. Somit werden ständig Edukte (Produkte) gebildet und zerstört.

