
Chemieskript der Universität Witten/Herdecke



Von Studenten, für Studenten
Version 2.0
Universität Witten/Herdecke
April 2012

Anmerkung des Herausgebers

Dieses Skript ist kein Ersatz für den Blick in ein Lehrbuch, sondern soll eine Hilfe sein bei der Orientierung, welche Grundkenntnisse und Grundbegriffe der Chemie wichtig für das Studium der Humanmedizin im Modellstudiengang erachtet werden. Die Auswahl der Inhalte erfolgte durch Studierende.

Dieses Skript ist in der vorliegenden Version 2.0 vom Juli 2012 unvollständig. Die noch fehlenden Themenbereiche sollen in den nächsten Semestern vervollständigt werden.

Witten, im April 2012

PD Dr. Andreas Savelsbergh

1	<i>Der Atombau</i>	8
1.1	Die Elementarteilchen.....	8
1.2	Elektronenhülle	10
2	<i>Das Periodensystem der Elemente</i>	12
2.1	Elemente	12
2.2	Ordnungsprinzipien	13
2.3	Die Elemente im menschlichen Körper	14
3	<i>Radioisotope</i>	16
3.1	Strahlung.....	16
3.2	Ionisierende Strahlung	16
4	<i>Chemische Bindungen</i>	17
4.1	Oktettregel:.....	17
4.2	Ionenbindung	17
4.3	Atombindung:	18
4.4	Metallische Bindungen:.....	20
5	<i>Zwischenmolekulare Anziehungskräfte</i>	22
6	<i>Aggregatzustände</i>	22
6.1	Allgemeines.....	22
6.2	Gase	23
6.3	Flüssigkeiten.....	24
6.4	Feststoffe	24
6.5	Phasenumwandlung	25
7	<i>Säuren und Basen</i>	29
7.1	Definition nach Arrhenius (1883).....	37
7.2	Definition nach Brönsted:	37
7.3	Protolyse-Reaktion:	37
7.4	Wichtige Säuren und Basen.....	37
7.5	Ampholyte:.....	38
7.6	Autoprotolyse des Wassers	38
8	<i>pH-Wert</i>	38
8.1	Säurestärke:	39
8.2	Basenstärke:.....	40
8.3	pH-Wert starke Säuren und Basen:.....	40
8.4	pH-Wert schwache Säuren und Basen:	40
8.5	pH-Wert von Salzen	40

8.6	Neutralisation:	41
8.7	Titration.....	41
9	Puffer.....	42
9.1	Pufferkapazität:	43
10	Chemische Reaktionen.....	27
11	Funktionelle Gruppen	44
11.1	Kohlenwasserstoffverbindungen	44
11.2	Alkohole, Phenole	46
11.3	Thiole	47
11.4	Ether.....	47
11.5	Amine	48
11.6	Ketone und Aldehyde	48
11.7	Schiff'sche Basen.....	49
11.8	Carbonsäuren.....	49
11.9	Reaktionstypen	50
12	Quellen:.....	52
12.1	Atombau, Periodensystem, Isotope	52
12.2	Chemische Bindungen, Aggregatzustände, Zwischenmolekulare Anziehungskräfte Chemische Reaktionen	52
12.3	Säuren und Basen.....	52
12.4	Funktionelle Gruppen.....	52
13	Autoren:	54

1 Der Atombau

1.1 Die Elementarteilchen

Bei der Zerlegung von Atomen können zahlreiche **subatomare** Partikel nachgewiesen werden.

Diese subatomaren Partikel werden als **Elementarteilchen** bezeichnet.

Um die wichtigsten Eigenschaften und Unterschiede von und zwischen Atomen verstehen zu können werden im folgenden Protonen, Neutronen und Elektronen etwas genauer erklärt.

Es sind ausser den oben genannten noch einige andere Elementarteilchen bekannt.

Im folgenden Text wird das Periodensystem der Elemente mit PS abgekürzt

Elementarteilchen: sind Bausteine der Atome

Protonen: positiv geladene Elementarteilchen, liegen im Kern

Neutronen: neutral geladene Elementarteilchen, liegen im Kern

Elektronen: negativ geladene Elementarteilchen, liegen in der Atomhülle

Name	Symbol	Ladung	Masse	Lage/ Ort
Protonen	p+	+	ca. 1	Atomkern
Neutronen	n	0	ca. 1	Atomkern
Elektronen	e-	-	5×10^{-4}	Atomhülle

Atommasse: Protonen und Neutronen sind etwa gleich schwer, die Elektronen hingegen wiegen nur etwa 1/2000 eines Protons.
Die Atomkerne enthalten normalerweise mindestens so viele Neutronen wie Protonen.
Daher: Masse = mindestens das Doppelte der Ordnungszahl (Ausnahme: Wasserstoff)

Element: Jedes Element des PS hat ein eigenes Elementsymbol / Zeichen
Atome eines Elements besitzen die gleiche KLZ

Kernladungszahl: = KLZ = Ordnungszahl
Gibt die Anzahl der Protonen im Kern an
Gibt gleichzeitig die Anzahl der Elektronen auf der Atomhülle an

Massenzahl: Gibt das Gewicht eines Atoms an
Also die Summe aus Protonen und Neutronen

12	24,305
Mg	
Magnesium	

Ordnungszahl

Atommasse

(die ungerade Zahl ergibt sich aus den natürlichen Isotopenmischungen)

Elementsymbol

Isotop: Atome mit gleicher Protonen-, aber unterschiedlicher Neutronenzahl
→ gleiche Ordnungszahl aber unterschiedliche Atommasse
Isotope besitzen ähnliche chemische Eigenschaften

Mol: Einheit für die bestimmt Stoffmenge / Teilchenanzahl
Avogadro-Konstante: $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
1 Mol eines Elements entspricht der relativen Atommasse in Gramm
1 Mol = Teilchenzahl in 12 g ^{12}C

1.2 Elektronenhülle

Der positiv geladene Atomkern (Protonen und Neutronen) wird von der negativ geladenen Atomhülle (Elektronen) umgeben.

Dabei haben die Elektronen der Hülle nicht alle die gleiche Energie.

Von dem Atomkern ausgehend verteilen Sie sich auf unterschiedliche **Hauptniveaus** (= Schalen).

Diese Hauptniveaus sind mit größer werdendem Abstand vom Atomkern mit den Buchstaben K, L, M, N u.s.w. benannt.

Dabei sind die Elektronen welche dichter am Atomkern liegen energieärmer als Elektronen der L oder M Schale.

Zur weiteren Unterteilung werden auch innerhalb der Hauptniveaus noch einmal mehrere **Unterniveaus** unterschieden.

Sie werden durch die Buchstaben s, p, d und f gekennzeichnet.

Die K-Schale enthält hierbei nur s-Elektronen.

Auf der L-Schale befinden sich s- und p-Elektronen und auf der M-Schale lassen sich s-, p- und d-Elektronen unterscheiden.

Jede Schale beginnt also wieder mit einem s Unterniveau.

Es gilt, dass ein Unterniveau mit 2 Elektronen voll besetzt ist.

Das heisst also, dass 1 s- und 3 p-Unterniveaus benötigt werden um die L-Schale voll zu besetzen.

Bei der Besetzung der Energieniveaus wird immer bei dem energieärmsten Niveau begonnen und dann nach oben aufgefüllt.

Hauptniveaus	Unterniveaus	Elektronenzahl pro Unterniveau	Elektronenzahl pro Schale
1.Schale = K-Schale	s	2	2
2.Schale = L-Schale	s	2	8
	p	6 (verteilt auf 3 p-Unterniveaus)	
3.Schale = M-Schale	s	2	18
	p	6 (verteilt auf 3p-Unterniveaus)	
	d	10 (verteilt auf 5d-Unterniveaus)	

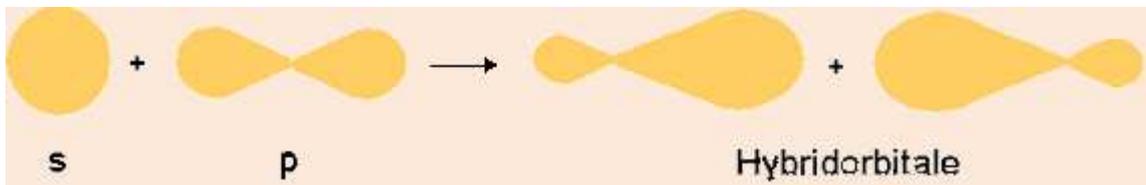
Elektronen-konfiguration Gibt die genaue Verteilung der Elektronen in der Atomhülle an
Dabei lassen sich verschiedene Energieniveaus unterscheiden
Es gibt Hauptniveaus und Unterniveaus

Orbital:

Ein Raum in der Elektronenhülle
Für diesen Raum wird die
Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines bestimmten
Elektrons beschrieben
Beschreibung einer Wolke mit negativer Ladung
(Elektronenwolke)
Dieser Raum kann unterschiedliche Formen haben
z.B. s-Orbitale sind kugelsymmetrisch
p-Orbitale sind hantelförmig

Hybridorbitale:

s - und p - Orbitale können sich energetisch
angleichen und neue, einheitliche Orbitale bilden

**Valenzelektronen:**

Die Elektronen der äußeren Schale des Atoms
Die Anzahl der Valenzelektronen wird durch die
Hauptgruppe angegeben
(Achtung: bei Helium nicht!)
Sie bestimmen die chemischen Eigenschaften der
Elemente daher haben Elemente derselben
Hauptgruppe auch ähnliche chemische
Eigenschaften

2 Das Periodensystem der Elemente

Das Periodensystem (PS) der Elemente ist ein 2-dimensionales Schema in dem die bekannten Elemente dargestellt sind.

Hierbei ist die Elektronenkonfiguration der Elemente die Grundlage für die Anordnung in das PS. Die Elektronenkonfiguration ist außerdem Grundlage für die verschiedenen chemischen Eigenschaften der Elemente.

Meyer und Mendelejew wussten noch nichts von Elektronenkonfigurationen. Sie machten die spannende Beobachtung, dass wenn sie die Atome nach zunehmender Atommasse (die Atommasse steht in Zusammenhang mit der Kernladungszahl – also mit der Anzahl der Protonen im Atomkern) aneinanderreihen, nach einer bestimmten Anzahl von Elementen wieder ein Element mit ähnlicher Eigenschaft auftrat.

Das PS entstand also durch Reihung der Elemente nach steigender Atommasse (=Kernladungszahl) und Zusammenfassung von chemisch verwandten Elementen in Gruppen.

Hier ein Tipp : <http://www.ptable.com/>

2.1 Elemente

Insgesamt sind derzeit **118 Elemente** bekannt – diese sind mit Ordnungszahlen von 1-118 belegt.

Elemente	Eigenschaften / Vorkommen
1-92	kommen in der Natur vor
>92	sind künstlich erzeugte Elemente durch kernchem. Synthese (z.B. Atomreaktoren)
84 – 118 + 43	sind radioaktiv

2.2 Ordnungsprinzipien

Die Elemente sind nach aufsteigender Ordnungszahl (=Kernladungszahl) so angeordnet, dass Elemente mit ähnlichen chemischen Eigenschaften untereinander stehen. Dabei werden Zeilen als Perioden und Spalten als Gruppen bezeichnet.

Periode: waagerechte Reihen (1.-7. Periode)
Gibt die Anzahl der Schalen des betreffenden Atoms an

Gruppe: senkrechte Spalten (8 Haupt- und 8 Nebengruppen)
alte Bezeichnung: Ia-VIIIa = Hauptgruppen
Ib-VIIb = Nebengruppen
Neue Bezeichnung: 1 + 2 und 3 - 18 = Hauptgruppen
3 - 12 = Nebengruppen

Hauptgruppe: Die alte Nummer der Hauptgruppe gibt die Anzahl der Valenzelektronen an
(Achtung: bei Helium nicht!)
Bei Hauptgruppenelementen werden Elektronen in eine äußere Schale aufgenommen (im Gegensatz zu Nebengruppenelementen)

Hauptgruppe (alte Bezeichnung)	Hauptgruppe (neue Bezeichnung)	Eigenschaften	Valenzelektronen
1.HG / Ia	1	Alkalimetalle	1Valenzelektron
2.HG / IIa	2	Erdalkalimetalle	2V.e.
3.HG / IIIa	13	Erdmetalle	3V.e.
4.HG / IVa	14	Kohlenstoffgruppe	4V.e.
5.HG / Va	15	Stickstoffgruppe	5V.e.
6.HG / VIa	16	Chalkogene	6V.e.
7.HG / VIIa	17	Halogene	7V.e.
8.HG / VIIIa	18	Edelgase	8V.e.

Nebengruppe: Haben i.d.R. 2 Valenzelektronen
Sind alles Metalle
Bei Nebengruppenelementen treten Änderungen der

Elektronenbesetzung von weiter innen liegenden Schalen auf
→ Dadurch entstehen nur relativ kleine Änderungen der chemischen Eigenschaften

Metalle: ein einzelnes Atom dieser Elemente macht kein Metall aus
Die charakteristischen Eigenschaften von Metallen entstehen durch metallische Bindung (siehe „chemische Bindungen“ weiter hinten)

2.3 Die Elemente im menschlichen Körper

Für die Lebewesen auf der Erde sind nur ca.20 von den 81 stabilen Elementen notwendig. Es fällt auf, dass die meisten dieser ca.20 Elemente in den ersten 4 Perioden auftreten. Viele Elemente mit höheren Ordnungszahlen/ Perioden werden in wassergelöster Form stark giftig für lebende Organismen.

Der Mensch besteht zu 55-60% aus Wasser.

Die feste Körpersubstanz ist hierbei nur zu einem ganz geringen Anteil aus Mineralien aufgebaut.

Das meiste „Feste“ im Körper besteht aus organischen Verbindungen.

Die folgende Tabelle auf der nächsten Seite zeigt die wichtigsten **Hauptgruppenelemente** welche im menschlichen Körper vorkommen.

Element	Anteil im Körper in %
Sauerstoff	65%
Kohlenstoff	18%
Wasserstoff	10%
Stickstoff	3%
Calcium	1,5%
Phosphor	1,0%
Schwefel	0,25%
Kalium	0,2%
Natrium	0,15%
Chlor	0,15%
Magnesium	0,05%

Sauerstoff, Kohlenstoff, Wasserstoff und Stickstoff zählen dabei zu den **Grundelementen** des Körpers.

Die anderen Mineralstoffe werden auch als **Mengenelemente** bezeichnet. Sie kommen also mit einem Massenanteil von mehr als 50mg/kg Körpergewicht im Körper vor.

Für die Funktion von bestimmten Enzymen sind Elemente aus den **Nebengruppen** lebensnotwendig.

Diese Nebengruppenelemente müssen regelmäßig mit der Nahrung/ Wasser aufgenommen werden. Die Menge welche dabei pro Tag benötigt wird ist sehr gering – man spricht bei diesen Elementen daher von sogenannten **Spurenelementen**.

Auch Fluor, Iod und Selen gehören zu den Spurenelementen – sie sind aber Elemente aus den Hauptgruppen.

Die folgende Tabelle zeigt die wichtigsten **Spurenelemente** welche im Körper vorkommen.

Element	Anteil im Körper in g/mg	Bedeutung/ Aufgabe
Eisen	4-5g	Sauerstofftransport im Blut Redoxvorgänge in Zellen
Zink	1.4-2,3g	Wichtig für Wachstum/ Reifung/ Kohlenhydrat- und Proteinstoffwechsel, DNS/ RNS-Synthese, Hormonstoffwechsel
Kupfer	75-150mg	Bestandteil von Oxidasen
Mangan	12-20mg	Wichtig für Blutgerinnung
Molybdän	5-9mg	Bestandteil der Atmungskette
Jod	keine Angabe	Wichtig für Schilddrüsenfunktion
Selen	keine Angabe	Aktivierung von Thyroxin zu T3
Chrom	0,6-1,4mg	Insulinwirkung

Grundelemente: Sauerstoff, Kohlenstoff, Wasserstoff, Stickstoff stehen in den Hauptgruppen des Periodensystems der Elemente
Machen ca.99% des Gesamtanteils der Biomasse aus

Mengenelemente: Stehen in den Hauptgruppen des PS
Kommen im Körper mit einem Massenanteil von > 50 mg/kg vor

Spurenelemente: Müssen dem Körper nur in sehr geringen Mengen (Spuren) zugeführt werden
Stehen überwiegend in den Nebengruppen des PS
Sind essentiell für die Funktion von Enzymen
Kommen im Körper mit einem Massenanteil von <50 mg/kg vor

3 Radioisotope

Schon 1896 entdeckte **Becquerel**, dass bestimmte Elemente die Eigenschaft besitzen, ohne äußeres Zutun Teilchen in Strahlenform auszusenden.

Der Begriff Radioaktivität wurde 1898 durch die Physikerin **Marie Curie** geprägt. Ihr gelang es, geringe Mengen des radioaktiven Elements Radium zu isolieren.

Erst später wurde festgestellt, dass die Radioaktivität auf einen Zerfall der Atomkerne zurückzuführen ist.

3.1 Strahlung

Radioaktivität:	Bestimmte Elemente setzen durch den Zerfall ihres Atomkerns Teilchen in Strahlenform frei
Strahlenarten:	Je nach Zerfallsart können radioaktive Elemente 3 klassische Strahlenarten aussenden
a) Alphastrahlen:	Bestehen aus positiv geladenen Heliumkernen
b) Betastrahlen:	Bestehen aus Elektronen des Atomkerns Entstehen durch Zerfall eines Neutrons in ein Proton und ein Elektron
c) Gammastrahlen:	Elektromagnetische Strahlung
Halbwertszeit:	Ist die Zeit, in der die Hälfte der bestimmten Zahl radioaktiver Atome zerfallen ist

Allgemein gilt, je energiereicher die Strahlung – desto größer die Wahrscheinlichkeit, dass Biomoleküle irreversibel geschädigt werden.

Die begrenzte Lebensdauer von radioaktiven Elementen wird durch die **Halbwertszeit** ($= t_{1/2}$) gekennzeichnet.

z.B. ein radioaktives Element mit einer Halbwertszeit von 1 Jahr bedeutet, dass von 1000 Atomen dieses Elements nach 1 Jahr noch 500 Atome vorhanden sind

3.2 Ionisierende Strahlung

Ionisierung:	Die Verschiebung von negativ geladenen Teilchen (also Elektronen) aus einem Atom/ Molekül Das Atom/ Molekül bleibt nun als positiv geladenes Kation zurück
Ionisierende Strahlung	Die Strahlung, die aus Atomen Elektronen verschieben kann, so dass positiv geladene Kationen zurückbleiben kann von radioaktiven Stoffen ausgehen
Strahlendosis:	Die Menge ionisierender Strahlen, die aufgenommen wurde.

Sievert:	Die Maßeinheit verschiedener Strahlendosen (Sv) Dient der Bestimmung der Strahlenbelastung biologischer Organismen Wird zur Analyse des Strahlenrisikos / der Strahlenbelastung verwendet
Biologische Wirkung	Ionisierende Strahlung erzeugt Radikale Dadurch: 1. Zerstörung des Moleküls 2. chemische Reaktionen durch die Radikale Gesundheitsschädlich für Lebewesen Aber zur Tumorbekämpfung erwünschter Effekt
Verwendung	In der Diagnostik (z.B. Szintigraphie) Als Tracer (= radioaktiv markierte Substanz, die am Stoffwechsel teilnimmt) Für die Strahlentherapie
Verwendete Stoffe:	- Tritium ^3H , ^{14}C (als Tracer) - ^{60}Co , ^{226}Ra (in der Strahlentherapie) - $^{99\text{m}}\text{Tc}$ -> geht als Gamma-Strahlung in ^{99}Tc (in der Diagnostik)

4 Chemische Bindungen

4.1 Oktettregel:

Atome streben immer die **Edelgaskonfiguration** (s^2p^6), also 8 Elektronen auf der äußersten Schale an. Dies ist der energieärmste Zustand. Edelgase haben daher keine Tendenz Bindungen einzugehen. Helium besitzt nur eine S-Schale und hat daher nur 2 Valenzelektronen. Alle anderen Edelgase haben 8 Valenzelektronen.

4.2 Ionenbindung

Eine Gitterstruktur, die aus **Kationen** und **Anionen** besteht. Der Zusammenhalt erfolgt durch die **elektrostatische Anziehung** der unterschiedlich geladenen Ionen.

Kationen:	Positiv geladene Teilchen
Anionen:	Negativ geladene Teilchen
Ionisierungsenergie:	Atome mit geringer Valenzelektronenzahl tendieren zur Elektronenabgabe, um Edelgaskonfiguration zu erreichen. Die dafür benötigte Energie nennt man Ionisierungsenergie. Ionisierungsenergie nimmt in einer Periode (Zeile)

	von links nach rechts und innerhalb einer Gruppe (Spalte) von unten nach oben zu.
Elektronenaffinität:	Energie, die bei Aufnahme eines Elektrons in die Elektronenhülle frei wird. Atome mit 6 oder 7 Valenzelektronen haben die Tendenz Elektronen aufzunehmen, um Edelgaskonfiguration zu erreichen.
Elektronegativität (EN):	Relativer Wert, um Ionisierungsenergie und Elektronenaffinität zu beschreiben. EN liegt zwischen 0,8 (Francium) und 4 (Fluor) EN nimmt im Periodensystem von links nach rechts und von unten nach oben zu. (Fluor rechts oben!)
Atomradien/Ionenradien:	Die Messung der Größe eines Atoms ist aufgrund der Quantenmechanik nicht so einfach möglich. Man untersucht daher den Radius, der sich zwischen zwei Atomen desselben Typs bildet und schließt dadurch auf die Größe des einzelnen Atoms zurück. Der Atomradius nimmt innerhalb einer Periode von links nach rechts ab; innerhalb einer Gruppe von oben nach unten zu
Salze:	Aus Ionen (geladene Teilchen) aufgebaute Kristallgitter Starke Kristallisationsstendenz Hohe Schmelzpunkte
Wertigkeit	Ionen können einfach oder mehrfach positiv oder negativ geladen sein. Man spricht von der Wertigkeit eines Ions.
Häufige Kationen:	Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , H^+ (Proton), Cu^{2+} , Fe^{2+} , Fe^{3+} , Co^{2+} , NH_4^+
Häufige Anionen:	F^- (Fluorid), Cl^- (Chlorid), Br^- (Bromid), I^- (Jodid), OH^- (Hydroxid), S^{2-} (Sulfid), SO_4^{2-} (Sulfat), NO_3^- (Nitrat), NO_2^- (Nitrit), PO_4^{3-} (Phosphat), HCO_3^- (Hydrogencarbonat), CO_3^{2-} (Carbonat), CH_3COO^- (Acetat), CN^- (Cyanid)

4.3 Atombindung:

Bindung zwischen Atomen, die durch Verbindung von Elektronen zu gemeinsamen **Elektronenpaaren** zustande kommen.

Synonyme: kovalente Bindung,
homöopolare Bindung,
Elektronenpaarbindung

Bindigkeit: Ein Atom kann zur selben Zeit mit mehreren anderen Atomen eine kovalente Bindung eingehen. Man bezeichnet dies als Bindigkeit. Jedes Atom versucht dabei den energieärmsten Zustand, also 8 Valenzelektronen auf der äußersten Schale (Edelgase), zu erlangen.

Beispiel:

Wasserstoff ist einbindig (hat 1, benötigt 2 Valenzelektronen)

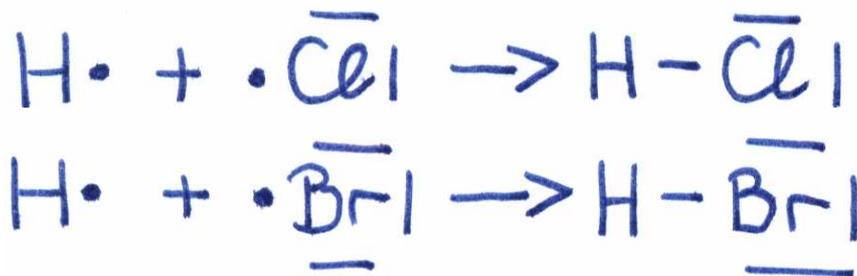
(durch 1 weiteres Elektron wird die äußerste Schale gefüllt, z.B. H₂)



Halogene sind einbindig (hat 7, benötigt 8 Valenzelektronen)

(durch 1 weiteres Elektron wird die äußerste Schale gefüllt)

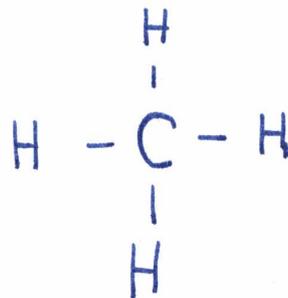
z.B. HCl, HBr)



Kohlenstoff ist vierbindig (hat 4, benötigt 8 Valenzelektronen)

(durch 4 weitere Elektronen wird die äußerste Schale gefüllt)

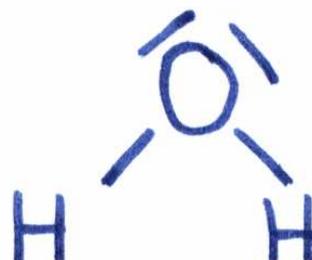
z.B. CH₄ (Methan))



Sauerstoff ist zweibindig (hat 6, benötigt 8 Valenzelektronen)

(durch 2 weitere Elektronen wird die äußerste Schale gefüllt)

z.B. H₂O)



Moleküle: Moleküle entstehen durch den Zusammenschluss von Atomen mittels kovalenter Bindungen. Die Molekülmasse ist dabei die Summe der Atommassen (Atommassen stehen im Periodensystem)
Moleküle werden durch Summen- oder Strukturformeln dargestellt. Elektronenpaare werden bei der Strukturformel immer durch einen Strich dargestellt.

Sauerstoff und Stickstoff Sauerstoff und Stickstoff kommen natürlich als N_2 : bzw. O_2 Moleküle vor.
Sauerstoff geht mit sich selbst eine Doppel- oder Einfachbindung ein.
Stickstoff geht mit sich selbst eine Dreifachbindung ein.

Radikal: Atome oder Moleküle mit mindestens einem freien, ungepaarten Elektron. Radikale sind sehr reaktionsfreudig.
Elementarer Sauerstoff (O_2) kommt meist als Diradikal vor und ist daher sehr reaktiv.

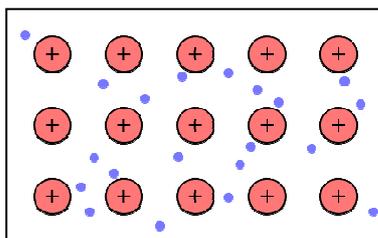
Ozon: Ozon hat die Summenformel O_3 . Sauerstoff kann durch UV- Strahlen zu Ozon umgewandelt werden.

Polarisierte Atombindung Hat in einem Molekül ein Bindungspartner eine: deutlich höhere Elektronegativität, so zieht er die Elektronen des elektronegativeren Partners zu sich hin. Da Elektronen negativ geladen sind, wird der elektronegativer Partner also etwas negativer geladen. Man spricht von einer polarisierten Atombindung oder einem Dipol.

Dipole: Ein nach außen hin elektroneutrales Molekül, bei welchem der Schwerpunkt von positiven und negativen Ladungen, aufgrund von unterschiedlicher Elektronegativität, nicht in die Mitte der Bindungspartner fällt.

4.4 Metallische Bindungen:

Die Valenzelektronen sind nur sehr schwach an ihr Atom gebunden. Die positiv geladenen Atomrümpfe bilden ein dichtes Gitter. Die Valenzelektronen können sich frei zwischen den Atomrümpfen bewegen.



Metalle: Elemente mit 1 – 2 Valenzelektronen außer Wasserstoff und Helium, sowie alle

	<p>Nebengruppenelemente und einige Elemente mit 3 Valenzelektronen. Metalle sind, aufgrund der freien Valenzelektronen, elektrisch leitfähig. Die Leitfähigkeit nimmt bei steigender Temperatur ab. Der Metallcharakter nimmt in einer Gruppe von oben nach unten zu, in einer Periode von rechts nach links zu.</p>
Halbleiter:	<p>Silicium und Germanium sind die einzigen Elementhalbleiter. Besitzen geringe elektrische Leitfähigkeit, die bei steigender Temperatur allerdings zunimmt.</p>
Legierung:	<p>Mischung durch Verschmelzung verschiedener Metalle zu Mischkristallgittern. Veränderung der physikalischen Eigenschaften durch Legierung (Härte, Leitfähigkeit, Korrosionsverhalten usw.) Beispiele: Stahl (Eisen mit Chrom, Nickel oder Molybdän) Messing (Kupfer mit Zink)</p>
Koordinative Bindung:	<p>Bindung, bei der beide Elektronen für die Elektronenpaarbindung von einem Bindungspartner stammen.</p>

5 Zwischenmolekulare Anziehungskräfte

Ionenbindung:	Anziehungskräfte zwischen geladenen Teilchen. Besitzen starke Anziehungskräfte. Teilchen mit Ionenbindung sind bei Raumtemperatur und normalem Luftdruck fest. Man bezeichnet dies auch als elektrostatische Anziehung.
Wasserstoff- Brücken	Wasser ist ein gewinkelter Dipol (s.o.). Die Anziehungskräfte im Wasser entstehen zwischen den positiv polarisierten Wasserstoffatomen und den negativ polarisierten Sauerstoffatomen. Die Bindungsstabilität beträgt nur ca. 1/20 der Ionenbindung oder kovalenten Bindung.
Van der Waals Kräfte:	Durch zufällige, ungleichmäßige Verteilung von Elektronen in einem ungeladenen Molekül kommt es zur kurzzeitigen Dipolbildung. Diese induziert beim Nachbarmolekül ebenfalls eine Dipolbildung. Durch diese Wechselwirkung kommt es zu Anziehungskräften zwischen ungeladenen Molekülen. Je größer ein Molekül, desto größer die Van der Waals Kräfte.
Grundsätzlich gilt:	Je stärker die zwischenmolekularen Anziehungskräfte sind, desto höher ist der Schmelz- und Siedepunkt.

6 Aggregatzustände

6.1 Allgemeines

Welcher Aggregatzustand eingenommen wird, hängt von den Kräften **Druck** und **Temperatur** ab, die auf ein Atom oder Molekül wirken. Das Atom oder Molekül verändert sich qualitativ. Für fast alle Stoffe sind alle Aggregatzustände bekannt.

Gasförmig:	Teilchen besitzen hohe kinetische Energie; haben großen Raumbedarf (aus 1 l Wasser entstehen 1673 l Wasserdampf!!!); willkürliche Teilchenbewegung; geringe Ordnung
Flüssig:	Teilchen besitzen geringe kinetische Energie Nur bestimmte Teilchenbewegungen möglich Teilchen treten in Wechselwirkungen Deutlich größere Ordnung
Fest:	Teilchen besitzen geringe kinetische Energie Nur Eigenrotation und Schwingungen möglich Starke Anziehungskraft zwischen den Teilchen Größte mögliche Ordnung

6.2 Gase

In Gasen sind keine oder nur sehr geringe zwischenmolekulare Anziehungskräfte vorhanden. Teilchen bewegen sich unabhängig voneinander.

H₂, O₂, N₂, Cl₂, F₂ und alle Edelgase sind bei Raumtemperatur gasförmig.

Kinetische Energie: Energie, die ein Objekt aufgrund seiner Bewegung aufweist. Sie entspricht der Arbeit, die aufgewendet werden muss, um das Objekt auf die aktuelle Geschwindigkeit zu beschleunigen. Sie hängt von der Masse und der Geschwindigkeit des Objektes ab.

Bsp.: Die kinetische Energie eines 100 km/h schnellen Autos entspricht der Arbeit, die ich aufwenden muss, um dieses Auto von 0 auf 100 km/h zu beschleunigen.

Druck: Durch das Zusammenstoßen von Teilchen untereinander und mit der Gefäßwand üben sie einen Druck aus. Je schneller die Teilchen, desto höher der Druck. Je höher die Temperatur, desto schneller die Teilchen.

Normaldruck: Luftdruck bei 0°C am Meeresspiegel beträgt 760 mm oder 1013 hpa.

Temperatur: Die Temperatur gibt die Geschwindigkeit von Teilchen an, die sich in einem bestimmten Objekt bewegen. Je höher die Geschwindigkeit der Teilchen, desto höher die Temperatur.

Absoluter Nullpunkt: Der absolute Temperaturnullpunkt wird bei -273,15°C (0 Kelvin) festgelegt, da bei dieser Temperatur ein ideales Gas ein Volumen von 0 einnehmen würde. Die Brownsche Molekularbewegung, also die Bewegungsenergie der Teilchen eines Atoms, ist bei diesem Punkt zum Erliegen gekommen. Da die Teilchenbewegung die Temperatur bestimmt, kann es definitionsgemäß keinen kälteren Punkt geben.

Ideales Gas: Ein Mol eines Gases nimmt bei „idealen Bedingungen“ (1013 hPa Druck und 273 K = 0°C Temperatur) ein Volumen von 22,4l ein. Dies gilt für jedes Gas.

Allgemeines Gasgesetz: Und nun etwas für die Formelliebhaber:

$$P \times V = n \times R \times T$$

P = Druck (N/m²)
R = allg. Gaskonstante(8,31J/mol x K)
V = Volumen (m³)
T = Temperatur (K)
N = Stoffmenge (mol)

6.3 Flüssigkeiten

In Flüssigkeiten sind die Anziehungskräfte so groß, dass die Teilchen sich nicht unabhängig voneinander bewegen können, jedoch nicht groß genug, um eine feste Gitterstruktur erzeugen zu können.

Bei Raumtemperatur gibt es nur 3 flüssige Elemente (Hg, Ga, Br₂), jedoch viele flüssige Verbindungen (z.B. H₂O)

Oberflächenspannung: An Oberflächen wirken die Kräfte von Teilchen nur in Richtung der Flüssigkeit. Aus diesem Grund krümmen sich flüssige Oberflächen. Es wird immer die kleinste, mögliche Oberfläche angestrebt. Daher kommt es zur Tropfenbildung. (die Kugel hat im Verhältnis zu ihrem Volumen die kleinste Oberfläche) Je größer die Anziehungskräfte zwischen den Flüssigkeitsmolekülen sind, desto größer ist auch die Oberflächenspannung. Wasser hat eine sehr hohe Oberflächenspannung! (z.B. im Vergleich mit Alkohol)

6.4 Feststoffe

Feststoffe besitzen die stärksten Anziehungskräfte. Die Bewegung der Teilchen ist nicht oder nur kaum möglich. Die Atome oder Moleküle ordnen sich in sehr regelmäßigen **Kristallgittern**.

Kristallgitter: Feste Anordnungsform von Feststoffen.
Teilchenbewegung nicht bzw. nur kaum möglich.
Größte, mögliche Ordnung.

Modifikationen: Kann bei einem Element die Anordnung der Atome geändert werden, so spricht man von Modifikationen eines Feststoffes. Die physikalischen Eigenschaften können sich dabei vollkommen verändern.

Bsp.: Graphit und Diamant sind zwei Modifikationen des Kohlenstoffs.

Graphit: schwarz, weich,
undurchsichtig, leitfähig

Diamant: farblos, sehr hart,
durchsichtig, nicht leitfähig

Amorphe Stoffe: Unregelmäßige Anordnung der Teilchen im Feststoff
z.B. Glas

6.5 Phasenumwandlung

Schmelzpunkt und **Siedepunkt** sind charakteristische Werte für eine Reinsubstanz. Die Werte sind für Stoffe unterschiedlich und sind von **Temperatur** und **Druck** abhängig. Verunreinigungen bewirken generell **Siedepunktserhöhung** und **Schmelzpunktserniedrigungen**. Bei einer Phasenumwandlung wird der Umgebung Energie in Form von Wärme entzogen. (z.B. Vereisen von Warzen durch Aufbringen leicht verdampfender Flüssigkeiten.)

Schmelzen: Zustandswechsel von Fest zu Flüssig
Die kinetische Energie nimmt zu.

Erstarren: Zustandswechsel von Flüssig zu Fest
Die kinetische Energie nimmt ab.

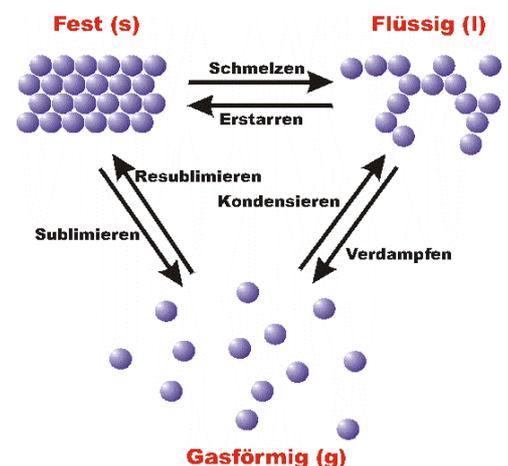
Verdampfen: Zustandswechsel von Flüssig zu Gasförmig.
Die kinetische Energie nimmt zu.

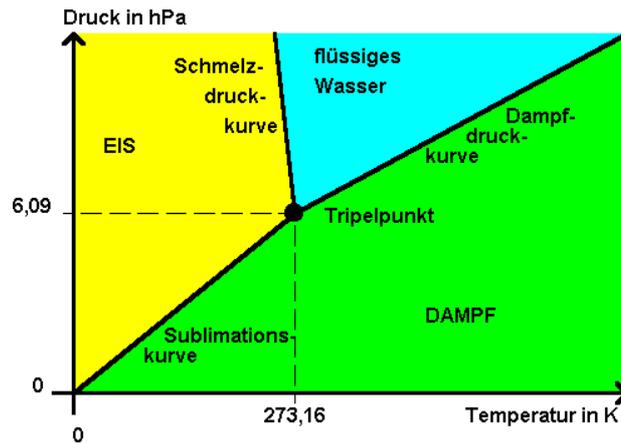
Kondensieren: Zustandswechsel von Gasförmig zu Flüssig.
Die kinetische Energie nimmt ab.

Sublimieren: Zustandswechsel von Fest zu Gasförmig.
Die kinetische Energie nimmt zu.

Resublimieren: Zustandswechsel von Gasförmig zu Fest.
Kinetische Energie nimmt ab.

Zu sehen sind die Aggregatzustände, ihre Übergänge und die Beweglichkeit der Teilchen





Zu sehen ist die Abhängigkeit der Aggregationszustände von Druck und Temperatur.

Es wird daraus ersichtlich, dass Feststoffe direkt in die Gasform übergehen können, ohne flüssig gewesen zu sein, wenn der Druck gering ist. (Bsp.: Trockeneis)

- Homogenes System:** Stoffe und Stoffgemische aus nur einem Aggregatzustand (z.B. Salzlösung, Luft)
- Heterogenes System:** Stoffgemische aus mehreren Aggregatzuständen (z.B. Nebel, Milch, Creme)
- Dispersionsmittel:** Der Stoff, der in einem heterogenen System überwiegt (z.B. Wasser fungiert als Dispersionsmittel beim Mischen mit H₂O)

7 Chemische Reaktionen

Stoffumwandlungen, die durch die allgemeine Reaktionsgleichung



beschrieben werden kann.

Der Pfeil gibt die Richtung der Reaktion an.

Solange ein Stoff an der Reaktion nicht teilnimmt, taucht er in der chemischen Reaktionsgleichung nicht auf.

Edukte: Sind die Ausgangsstoffe einer Reaktion (**A und B**)

Produkte: Sind Produkte der chemischen Reaktion (**C und D**)

Massenerhaltungssatz: Bei einer Reaktionsgleichung muss die Teilchenzahl eines Elementes auf beiden Seiten gleich sein.

Merke: Bei einer Reaktion gehen keine Elemente verloren!!!

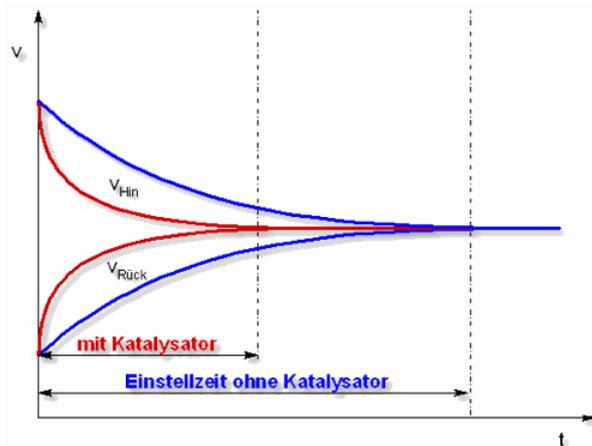
Ladungserhaltungssatz: Bei einer Reaktionsgleichung muss die Gesamtladung auf beiden Seiten gleich sein.

Stöchiometrie: Mathematisches Rechenverfahren zur Klärung der Frage: Wie viel Edukt muss ich einsetzen um x Produkte zu erhalten?

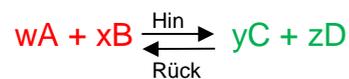
Molarität: Es handelt sich um eine Konzentrationsangabe. Sie gibt an, wie viel Mol (= $\sim 6,02 \times 10^{23}$ Teilchen [Mol ist eine festgelegte Zahl!]) eines Stoffes in einem Liter der fertigen Lösung gelöst sind.

Chemisches Gleichgewicht: Reaktionen laufen meist nicht vollständig ab d.h. nicht alle Edukte werden auch zu Produkten umgewandelt (je mehr Produkte, desto geringer die Reaktionsgeschwindigkeit).

Ist die Hinreaktionsgeschwindigkeit(V_{Hin}) gleich der Rückreaktionsgeschwindigkeit($V_{\text{Rück}}$), so kommt die Reaktion (zumindest scheinbar) zum Erliegen. Ein chemisches Gleichgewicht hat sich eingestellt.



Und hier für alle Formelliebhaber die dazugehörige Formel:



Man spricht auch von einem dynamischen Gleichgewicht, weil genau so viele Produkte neu entstehen, wie andere Produkte zu Edukten zurückreagieren. (daher auch nur scheinbarer Reaktionsstillstand. Die Reaktion endet genau genommen nie)

Massenwirkungsgesetz: Mit dieser Formel kann man bestimmen, auf welcher Seite der Reaktionsgleichung das chemische Gleichgewicht liegt, also ob bei der Reaktion viele Produkte entstehen oder ob die Edukte lieber Edukt bleiben und nicht miteinander reagieren.

Die Formel:

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

$K > 1$: Reaktionsgleichgewicht liegt auf der Seite der Produkte

(viele Produkte, wenig Edukte)

$K < 1$: Reaktionsgleichgewicht liegt auf der Seite der Edukte

(wenig Produkte, viele Edukte)

Gleichgewichtsverschiebung:

Um die Hinreaktion konstant am Laufen zu halten kann man entweder die Konzentration der Edukte erhöhen oder die entstandenen Produkte entfernen.

8 Thermodynamik chemischer Reaktionen: Warum laufen Reaktionen ab und in welche Richtung?

8.1 Überblick / Allgemeines

Bei einer chemischen Reaktion findet eine Umverteilung der Atome statt. Dabei lässt sich eine stoffliche Umwandlung und ein Energieumsatz feststellen. Die Gesetze der Thermodynamik ermöglichen die Voraussage, ob eine chemische Reaktion unter den gegebenen Bedingungen ablaufen kann, man muss nur die Energieänderung im Laufe der chemischen oder physikalischen Reaktion beachten.

Die Energie von Stoffen ist abhängig von bestimmten Parametern wie Druck p , Temperatur T und Volumen V .

Chemische Reaktionen sind grundsätzlich mit der Freisetzung oder dem Verbrauch von

Energie (Wärme, Licht, elektrische Energie, Druck, Schall, etc.) verbunden.

→ Mit diesen energetischen Effekten beschäftigt sich die

chemische Thermodynamik (thermos griech. warm, dynamis griech. Kraft)

Thermodynamische Kontrolle:

Reaktionen unterliegen der thermodynamischen Kontrolle. Dies bedeutet, dass bevorzugt stabilere und energieärmere Produkte entstehen.

8.2 Thermodynamische Systeme

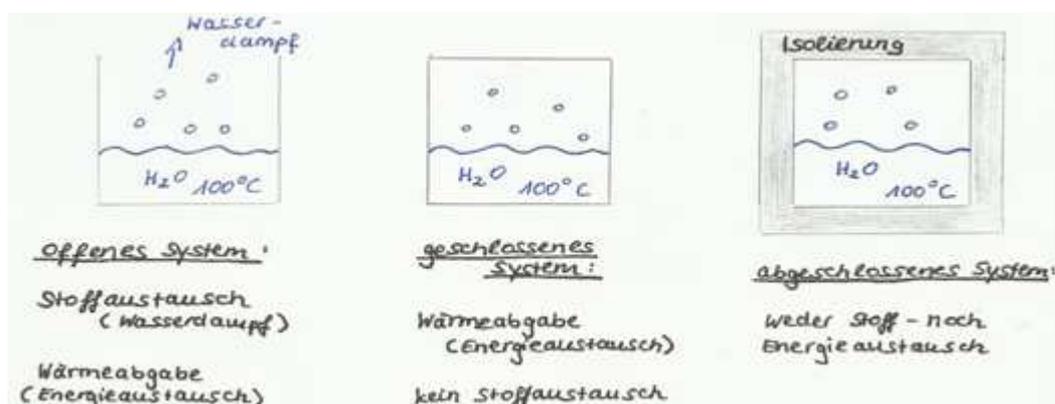
System:

Bestimmter Reaktionsraum, der von der Umgebung durch Wände abgegrenzt ist und nur begrenzt mit der Umwelt kommunizieren kann.

Abgeschlossene Systeme: weder Stoff- noch Energieaustausch mit der Umgebung (z.B. Thermoskanne)

Geschlossene Systeme: kein Stoff- aber Energieaustausch mit der Umgebung (z.B. Pflanzen in einem geschlossenen Glasgefäß)

Offene Systeme: Stoff- und Energieaustausch mit der Umgebung (z.B. Menschen, Tiere, Pflanzen)



8.3 Die innere Energie U

Ein System hat eine innere Energie U, die die Summe aller möglichen Energieformen darstellt. Es handelt sich dabei um Anziehungskräfte und Abstoßungskräfte zwischen Atomen, Molekülen, Ionen und deren kinetische Energie (Bewegungsenergie).

8.3.1 Der 1.Hauptsatz der Thermodynamik

Wenn von einem System Wärme Q aufgenommen oder abgegeben wird und wenn vom System oder am System Arbeit W geleistet wird, so ändert sich deren innere Energie U.

Nimmt ein System mit der inneren Energie U_1 Wärme Q aus der Umgebung auf, hat es nun die innere Energie $U_1 + Q$. Wenn nun das System einen Teil seiner inneren Energie aufwendet um Arbeit W zu leisten, nimmt seine innere Energie wieder ab. Seine innere Energie im Endzustand ist dann $U_2 = U_1 + Q - W$

Die Energiedifferenz zwischen Anfangszustand U_1 und Endzustand U_2 beschreibt folgende Gleichung:

$$\Delta U = U_2 - U_1 = Q - W \quad U_1: \text{Anfangszustand} \quad U_2: \text{Endzustand}$$

$\Delta U \geq 0$: Energie wird aufgenommen $\Delta U \leq 0$:

Energie wird abgegeben

Diese Gleichung entspricht dem 1.Hauptsatz der Thermodynamik (**Energieerhaltungssatz**):

Energie kann von einer Form in eine andere umgewandelt werden, sie kann jedoch weder erzeugt noch zerstört werden. Für ein abgeschlossenes System gilt: $\Delta U = 0$ (es gibt keine Energieänderung)

Die Thermodynamik befasst sich also mit der **Änderung der inneren Energie**.

8.3.2 Reaktionsenthalpie (=Reaktionswärme)

Die innere Energie U einer chemischen Reaktion ändert sich wenn sie entweder Wärme aufnimmt oder abgibt. Wenn bei Ablauf einer chem. Reaktion mechanische Arbeit beteiligt ist, so wird diese meist in Form von Volumenarbeit geleistet. Wenn bei dieser Reaktion Gase entstehen, so dehnt sich das System vom Anfangsvolumen V_1 auf das Endvolumen V_2 aus und leistet Arbeit gegen den Druck p der Atmosphäre

$$W = p \cdot \Delta V$$

Bei praktisch allen biochemischen Reaktionen wird weder Druck- noch Volumenarbeit geleistet, daher gilt:

$$\Delta H = \Delta U \text{ für } p, V = \text{konstant}$$

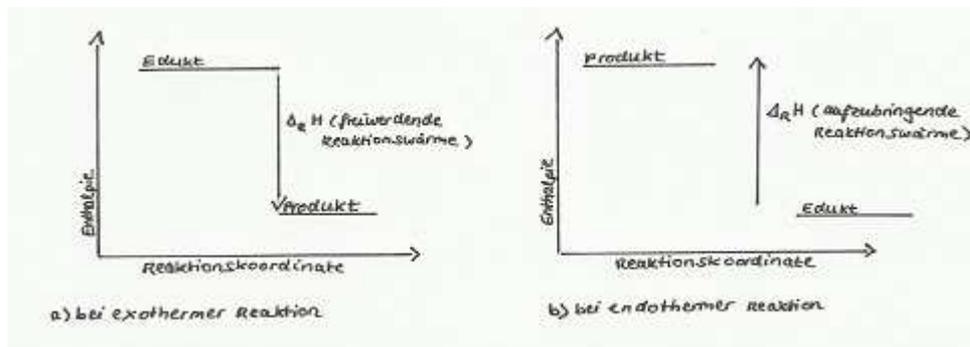
Die Energie wird immer vom System aus betrachtet:

Wenn das System Energie abgibt, kennzeichnet man das mit einem negativen Vorzeichen.

Energiezufuhr erkennt man am positiven Vorzeichen

Die Enthalpie chemischer Reaktionen ist temperatur-und druckabhängig, deshalb bezieht man sich meist auf die Normalbedingungen: 25 °C und 101,3 kPa (gekennzeichnet durch hochgestellte Null ΔH^0)

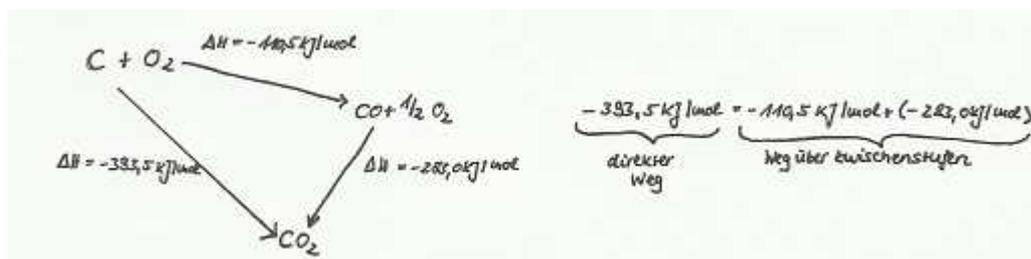
Enthalpiediagramm:



8.3.3 Satz von Hess

Eine Reaktion kann auf verschiedenen Wegen entstehen. Die Reaktionsenthalpie ist jedoch vom Reaktionsweg unabhängig (Satz von Hess), sie ist konstant. So ergibt sich z.B. für die Verbrennung von Kohlenstoff unabhängig davon, ob man den direkten Weg (Weg 1) oder Zwischenstufen wählt (Weg 2) immer die Reaktionsenthalpie $\Delta H^0 = -393,8 \text{ kJ/mol}$.

Man addiert einfach die Reaktionsenthalpien (meist die Standard-Bildungsenthalpien) der Einzelschritte und erhält so den gleichen Wert wie man ihn beim direkten Weg findet.



8.3.4 Standardbildungsenthalpie:

Die Standardbildungsenthalpie ist die Energie, die bei der Bildung von einem Mol einer Substanz unter Standardbedingungen (101,3 kPa und 25 °C (298K)) frei wird oder zur Bildung erforderlich ist. Sie wird in Kilojoule pro Mol angegeben und mit ΔH^0 bezeichnet.

$$\Delta H_f^0 = \Delta_B H^0(\text{Produkte}) - \Delta_B H^0(\text{Edukte})$$

Die Standard-Bildungsenthalpie $\Delta_f H^0$ enthält man aus der Reaktionswärme, die bei der Reaktion frei wird. Für die stabilste Form wird die Bildungsenthalpie gleich 0 gesetzt (hier wird keine Wärme frei).

Standardbildungsenthalpien $\Delta_{\text{B}}H^{\circ}$ / (kJ mol ⁻¹) bei 298 K			
H ₂ O (l)	- 285,8	H ₂ O ₂ (l)	- 187,8
NH ₃ (g)	- 46,1	N ₂ H ₄ (l)	+ 50,6
HN ₃ (l)	+ 264	NO (g)	+ 90,3
NO ₂ (g)	+ 33,2	N ₂ O ₄ (g)	+ 9,2
NaCl (s)	- 411,2	KCl (s)	- 436,8

8.3.5 Die Lösungsenthalpie

Beim Lösen von Stoffen kommt es auch zu Energieveränderungen. Die Lösung kann sich entweder erwärmen oder abkühlen. Diese mit dem Lösen zusammenhängende Reaktionsenthalpie bezeichnet man als Lösungsenthalpie $\Delta_{\text{L}}H$ oder Lösungswärme.

Man kann sie wie folgt berechnen:

$$\Delta_{\text{L}}H = \Delta_{\text{H}}H(\text{Kationen}) + \Delta_{\text{H}}H(\text{Anionen}) - U_{\text{G}}$$

$\Delta_{\text{H}}H$ = Hydratationsenthalpie, d.h. die Energie, die bei der Bildung einer Hydrathülle um die Kationen und die Anionen freigesetzt wird.

U_{G} = Gitterenergie, d.h. die Energie, die bei der Zusammenführung von Ionen zum Kristall frei wird (negatives Vorzeichen).

Wird durch die Hydratation der Ionen mehr Energie frei, als für die Trennung des Gitters benötigt wird, ist der Lösevorgang exotherm. Wenn die Gitterenergie jedoch größer ist und die freiwerdende Hydratationsenthalpie nicht ausreicht, ist der Lösevorgang endotherm.

8.4 Der freiwillige Ablauf von Reaktionen

Es ist immer wichtig zu wissen, ob eine Reaktion freiwillig abläuft oder nicht. Sowohl die Energieänderung (Enthalpie) als auch die Zunahme der Unordnung in einem System (Entropie) sind Faktoren, die über die Freiwilligkeit einer Reaktion (Freie Enthalpie) entscheiden.

8.4.1 Die Entropie S

Zur Beschreibung des inneren Ordnungszustandes eines Systems verwendet man den Begriff der Entropie S (en griech. in, tropos griech. Wendung, Richtung).

Die Entropie ist das Maß für die Unordnung in einem System, d.h. je geringer die Ordnung in einem System, desto größer ist die Entropie. Ein System strebt immer einen Zustand größter Unordnung an.

Jede spontane Änderung in einem abgeschlossenen System ist mit einer Entropieänderung verbunden.

$\Delta S > 0$: Unordnung nimmt zu, Ordnung nimmt ab
 $\Delta S < 0$: Unordnung nimmt ab, Ordnung nimmt zu

Man kann hier einen **2. Hauptsatz der Thermodynamik** formulieren:

Bei einer spontanen (freiwilligen) Zustandsänderung vergrößert sich die Entropie. Freiwillig stellt sich somit immer nur ein Zustand mit geringer Ordnung ein.

Beispiel: Die Vermischung zweier Gase

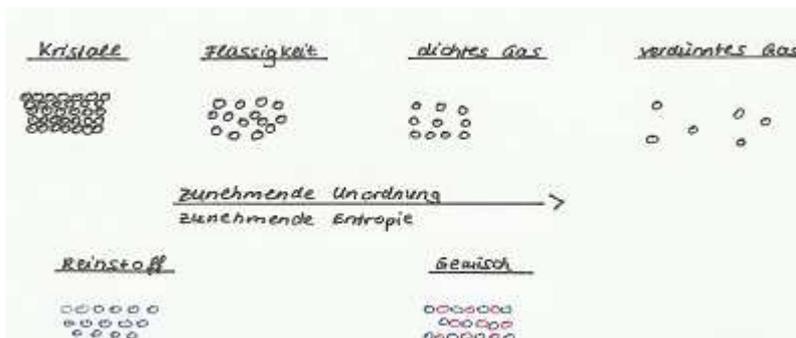
Wenn 2 Gefäße, in denen sich 2 verschiedene Gase bei gleichem Druck befinden, miteinander verbunden werden, so vermischen sich die beiden Gase spontan (freiwillig).

Warum vermischen sich die beiden Gase? Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik macht hierüber keinerlei Aussage. Während sich die Gase vermischen, bleibt das Gesamtvolumen, der Druck und die Temperatur konstant. Bei idealen Gasen gibt es auch keine intermolekularen Kräfte, d.h. weder die innere Energie noch die Enthalpie werden verändert. Beim Vermischen wird ein Zustand höherer Entropie erreicht. Anfangs herrscht eine große Ordnung, am Ende sind die Moleküle völlig durchmischt. Eine spontane Entmischung der Gase wäre allerdings nicht möglich.

Für einen gegebenen Zustand hat der feste, kristalline Zustand die höchste Ordnung und die geringste Entropie.

Der gasförmige Zustand hat die höchste Entropie

Der flüssige Zustand liegt dazwischen



8.4.2 Die freie Reaktionsenthalpie ΔG

Jedes System strebt einen Zustand möglichst geringer Energie ($\Delta H \ll 0$) und möglichst großer Unordnung ($\Delta S \gg 0$) an (so läuft die Reaktion freiwillig ab)

Man kann die Enthalpie H und die Entropie S durch eine Gleichung miteinander verknüpfen. Dadurch ergibt sich eine neue Größe, die die Freiwilligkeit des Ablaufs einer Reaktion darlegt:

$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$ (**Gibbs-Helmholtz-Gleichung**)

T = Temperatur in Kelvin

ΔG = Änderung der freien Enthalpie (Gibbs-Energie)

Die freie Enthalpie ΔG gibt Auskunft darüber, ob eine Reaktion freiwillig abläuft oder Energie benötigt. Sie hängt von 3 Größen ab: Enthalpieänderung ΔH , Entropieänderung ΔS , Temperatur T (Kelvin)

Für geschlossene Systeme gilt:

Ist ΔG negativ, so läuft die Reaktion freiwillig ab; sie ist **exergon**.

Ist ΔG positiv, so läuft die Reaktion unter den gegebenen Bedingungen nicht freiwillig ab; sie ist **endergon**.

Ist ΔG gleich 0, so liegt ein **Gleichgewicht** vor.

Eine freie Standard-Reaktionsenthalpie, die wir mit ΔG° bezeichnen, ist die freie Reaktionsenthalpie für einen Vorgang, der bei Normdruck (101,3 kPa) stattfindet. Der Wert für ΔG° kann aus freien Standard-Bildungsenthalpien (siehe oben) berechnet werden.

Mit der freien Reaktionsenthalpie werden 2 Faktoren berücksichtigt, die für die Freiwilligkeit einer Reaktion von Bedeutung sind:

Bei einer Reaktion wird ein **Energieminimum** angestrebt

Bei einer Reaktion wird ein **Maximum an Unordnung** angestrebt

8.5 Thermodynamisches Gleichgewicht und ΔG

In Hinblick auf die freie Enthalpie kann man sich merken, dass eine Reaktion abläuft, solange $\Delta G < 0$

gilt. Wenn $\Delta_R G = 0$ ist, hat die Reaktion keine Triebkraft mehr, der Gleichgewichtszustand hat sich eingestellt.

Jede Reaktion erreicht nach einer gewissen Zeit ein Gleichgewichtszustand, bei dem Hinreaktion und Rückreaktion gleich schnell ablaufen.

Die Konzentrationen der Einzelnen Komponenten im Gleichgewichtszustand beschreibt folgendes Massenwirkungsgesetz:

$$K = \frac{[C]^* [D]}{[A]^* [B]}$$

[A], [B] Konzentrationen der Edukte

[C], [D] Konzentrationen Produkte im Gleichgewicht

K ist die **Gleichgewichtskonstante**, die in direkter Beziehung zu ΔG° , der Änderung der freien Enthalpie G der Reaktionsgleichung unter Standardbedingungen steht.

Die freie Enthalpie G einer Substanz in einem beliebigen Zustand hängt mit der freien Standard-Enthalpie G° über folgende Gleichung zusammen:

$$G = G^\circ + R \cdot T \cdot \ln a$$

Dabei ist a die Aktivität der Substanz. Die Aktivität einer reinen Substanz im Standardzustand ist $a=1$ und $G=G^\circ$.

Die Änderung der freien Enthalpie im Verlaufe einer Reaktion kann mit folgender Gleichung beschrieben werden:

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln K$$

$$G = \Delta G^\circ + RT \ln K$$

K= Gleichgewichtskonstante

R =allgemeine Gaskonstante

T= Temperatur

Im Gleichgewichtszustand ist $\Delta G = 0$

Aus der Gleichung ergibt sich also $0 = \Delta G^\circ + RT \ln K \rightarrow \Delta G^\circ = - RT \ln K$

Aus der Lage des Gleichgewichts kann man also auf die Freie Reaktionsenthalpie einer Reaktion schließen und umgekehrt!

8.5.1 Das Prinzip des kleinsten Zwangs

Die Gleichgewichtslage und damit die Ausbeute eines bestimmten Produktes kann durch äußere Faktoren wie Temperatur, Druck usw. beeinflusst werden durch:

- Änderung der Konzentrationen der Reaktionsteilnehmer (durch Konzentrationserhöhung eines Ausgangsstoffes erhöht sich die Konzentration eines Endproduktes.
Oder: Die Reaktion verläuft in Richtung der Endprodukte, wenn ein Endprodukt ständig aus der Gleichung entfernt wird)
- Temperaturänderung (Temperaturerhöhung begünstigt einen endothermen Prozess, Temperaturniedrigung begünstigt einen exothermen Prozess)
- Druckänderung (v.a. bei Gasen)

Die Reaktion verläuft immer so, dass ein neues Gleichgewicht entsteht, so wird der äußere Zwang vermindert.

8.6 Aktivierungsenergie

Wenn Teilchen zusammenstoßen kommt es erst dann zu einer Reaktion, wenn sie eine bestimmte Mindestenergie besitzen. Die notwendige Mindestenergie ist die Aktivierungsenergie E einer Reaktion.

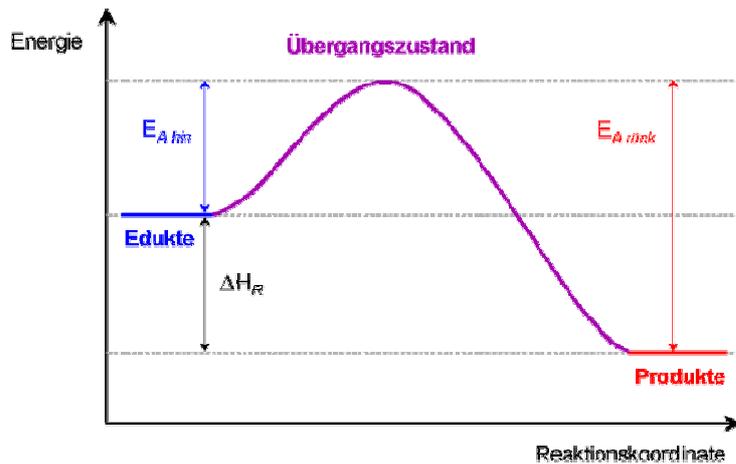
Die Arrhenius-Gleichung beschreibt den Zusammenhang zwischen Geschwindigkeitskonstante k , Aktivierungsenergie E und der absoluten Temperatur T .

$$k = A \cdot e^{-E/RT}$$

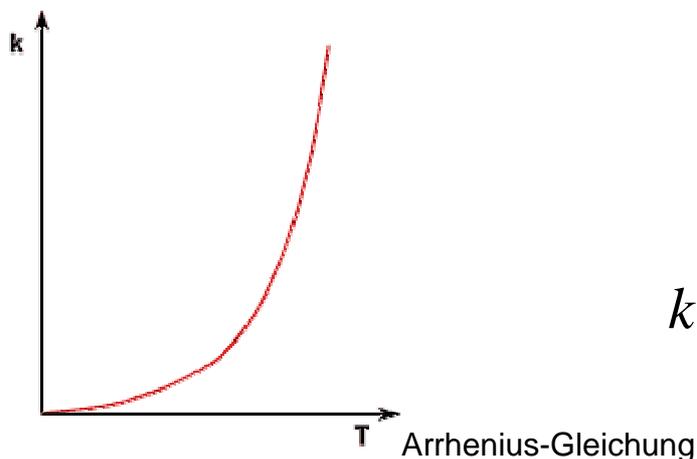
A = reaktionsspezifische Konstante

R = allg. Gaskonstante

Der Exponent entspricht dem Anteil der Teilchen, deren Energie größer als die Aktivierungsenergie ist



Die Geschwindigkeitskonstante k und damit auch die Reaktionskonstante sind temperaturabhängig. Hohe Temperaturen beschleunigen eine Reaktion, weil die Bewegungsenergie der Moleküle zunimmt. Je größer die Aktivierungsenergie einer Reaktion ist, d.h. je mehr Energie aufgebracht werden muss damit die Reaktion startet, desto langsamer läuft diese ab. Laut der RGT-Regel (= Reaktionsgeschwindigkeit-Temperatur-Regel) verdoppelt sich die Reaktionsgeschwindigkeit wenn die Temperatur um 10°C erhöht wird.



$$k = A \cdot e^{\frac{-E_A}{RT}}$$

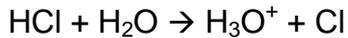
Arrhenius-Gleichung

9 Säuren und Basen

9.1 Definition nach Arrhenius (1883)

Säuren geben in wässriger Lösung H^+ -Ionen ab. Basen geben in wässriger Lösung OH^- -Ionen ab.

Beispiel



HCl ist eine Säure, da es ein H^+ -Ion abgibt



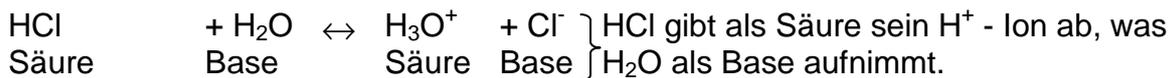
$Ca(OH)_2$ ist eine Base, da es OH^- -Ionen abgibt

Neutralisationsreaktion: $H^+ + OH^- \rightarrow H_2O$

9.2 Definition nach Brönsted:

Säuren geben H^+ -Ionen ab. Sie heißen deshalb Protonendonatoren. Basen nehmen H^+ -Ionen auf. Sie heißen deshalb Protonenakzeptoren.

Beispiel:

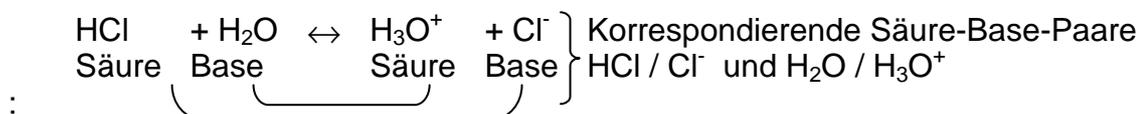


9.3 Protolyse-Reaktion:

Es gibt keine freien H^+ -Ionen in wässrigen Lösungen. Wenn eine Säure H^+ abgibt, muss sie mit einer Base reagieren, die H^+ aufnimmt. Bei der Reaktion einer Säure mit einer Base wird ein Proton übertragen. Man bezeichnet diese Reaktion daher als Protolyse.

Die bei der Protolyse-Reaktion entstehenden Verbindungen nennt man korrespondierende Säure-Base-Paare. Säure und Base unterscheiden sich nur durch das übertragene Proton. Die Säure hat ein H^+ -Ion mehr als die Base.

Beispiel



9.4 Wichtige Säuren und Basen

Wichtige Säuren:

HCl	Salzsäure (z.B. im Magen)
HNO ₃	Salpetersäure
H ₂ SO ₄	Schwefelsäure
H ₃ PO ₄	Phosphorsäure
H ₂ CO ₃	Kohlensäure
CH ₃ COOH	Essigsäure

Wichtige Basen:

nach Arrhenius:

NaOH	Natriumhydroxid
KOH	Kaliumhydroxid
Mg(OH) ₂	Magnesiumdehydroxid
Ca(OH) ₂	Calciumhydroxid

nach Brönsted:

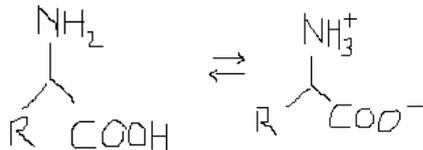
NH ₃	Ammoniak
-----------------	----------

9.5 Ampholyte:

Substanzen, die je nach Reaktionspartner als Säure oder Base reagieren können, bezeichnet man als Ampholyte. Sie sind Anionen mehrprotoniger Moleküle, die schon ein H^+ -Ion abgegeben haben, jedoch selbst noch mindestens ein H^+ -Ion besitzen. Dieses können sie noch abgeben. Sie sind **amphoter**.

Beispiele: H_2O , HSO_4^- , $H_2PO_4^-$, HCO_3^-

Aminosäuren haben in einem Molekül eine saure und eine basische Gruppe:



9.6 Autoprotolyse des Wassers

Wasser (H_2O) ist ein Ampholyt. Es kann mit sich selbst in Form einer Protolyse reagieren:



Für Gleichgewichte gilt das Massenwirkungsgesetz:

$$K = \frac{[H_3O^+] \cdot [OH^-]}{[H_2O]^2}$$

Da Wasser wenig dissoziiert ist, bleibt die Konzentration von Wasser in einer wässrigen Lösung nahezu konstant. $[H_2O]^2$ kann somit in die Konstante des Massenwirkungsgesetzes mit einbezogen werden

$K_{\text{Wasser}} = [H_3O^+] \cdot [OH^-] = \text{Ionenprodukt des Wassers.}$

Es beträgt bei 22°C $10^{-14} \text{ mol}^2/\text{l}^2$

$$\rightarrow [H_3O^+] \cdot [OH^-] = 10^{-14} \text{ mol}^2/\text{l}^2$$

\rightarrow kennt man $[H_3O^+]$, so kann man mit Hilfe des Ionenprodukts $[OH^-]$ berechnen und umgekehrt.

10 pH-Wert

Die Konzentration an H_3O^+ -Ionen gibt an, wie sauer eine Lösung ist. Die Konzentration an OH^- -Ionen gibt an, wie basisch (alkalisch) eine Lösung ist. Da man nicht mit Zahlen wie 10^{-14} arbeiten wollte, hat man sich zur vereinfachten Darstellung der H_3O^+ -Ionen-Konzentration den Logarithmus zu Nutzen gemacht:

pH = - log [H_3O^+] Der pH-Wert ist der negative dekadische Logarithmus der Hydroniumionenkonzentration [H_3O^+]

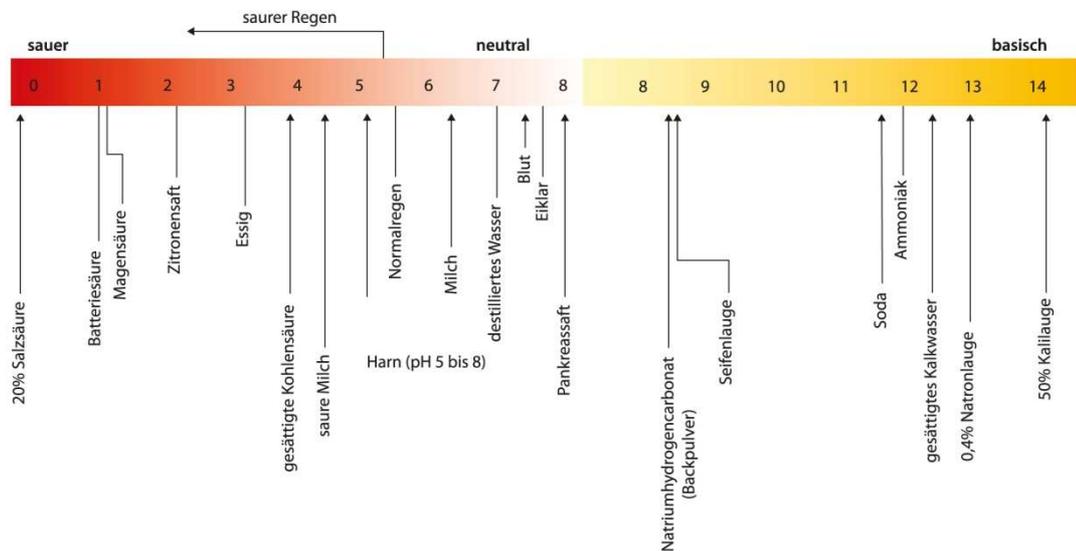
Der pOH-Wert kann analog dem pH-Wert angegeben werden:

$$\text{pOH} = - \log [OH^-]$$

Es gilt:

$$\text{pH} + \text{pOH} = 14$$

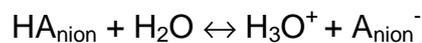
Der pH-Wert wirkt sich verschieden auf die Struktur von Zellbestandteilen, die Zellwanddurchlässigkeit und den Aufbau von Proteinmolekülen aus. Er bestimmt die Wirksamkeit von Hormonen und Enzymen und die Verteilung von Elektrolyten.



10.1 Säurestärke:

Der pH-Wert gibt an, wie sauer eine Lösung ist. Er gibt nicht an, wie stark eine Säure ist.

Die Säurestärke gibt an, wie stark die Tendenz der Säure ist, Protonen abzugeben.



Je weiter das Gleichgewicht der Protolysereaktion auf der rechten Seite der Reaktionsgleichung liegt, desto stärker ist die Säure. Eine weitere Aussage über die Stärke einer Säure macht das Massenwirkungsgesetz:

$$K = \frac{[H_3O^+] \cdot [A_{\text{nion}}^-]}{[H_2O] \cdot [HA]}$$

Da die Konzentration von Wasser in wässrigen Lösungen sich nur wenig ändert, kann $[H_2O]$ mit in die Konstante einbezogen werden.

$$K_{\text{Säure}} = \frac{[H_3O^+] \cdot [A_{\text{nion}}^-]}{[HA]}$$

$K_{\text{Säure}}$ ist die **Säurekonstante**.
Ist $K_{\text{Säure}}$ groß, ist die Säure stark.

Um den Zahlenwert wiederum überschaubar zu machen, wird auch hier häufig der negativ dekadische Logarithmus angegeben:

$$pK_{\text{Säure}} = -\log K_{\text{Säure}}$$

Je größer $pK_{\text{Säure}}$, desto schwächer ist die Säure (andersherum als beim $K_{\text{Säure}}$, da der negativ dekadische Logarithmus genommen wurde!)

- $pK_{\text{Säure}} < 0$ starke Säure
- $0 < pK_{\text{Säure}} < 2$ mittelstarke Säure
- $pK_{\text{Säure}} > 2$ schwache Säure

10.2 Basenstärke:

Alle Arrhenius-Basen sind starke Basen. Sie zerfallen vollständig in Metallionen und dissoziieren OH^- .

Die Stärke der Brönsted- Basen ist davon abhängig, wie stark ihre Tendenz ist, von Wasser ein H^+ aufzunehmen.



Auch hier kann man das Massenwirkungsgesetz anwenden und analog zu den Säuren die Basenstärke angeben:

$$K_{\text{Base}} = \frac{[\text{HB}] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{B}^-]} \quad K_{\text{Base}} \text{ ist die Basenkonstante.}$$

Auch bei der Basenkonstanten kann man den $\text{p}K_{\text{Base}}$ -Wert berechnen:

$\text{p}K_{\text{Base}} = -\log K_{\text{Base}}$ Je größer der $\text{p}K_{\text{Base}}$ -Wert ist, desto schwächer ist die Base.

Für korrespondierende Säure-Basen-Paare gilt also:

$$\text{p}K_{\text{Säure}} + \text{p}K_{\text{Base}} = 14$$

10.3 pH-Wert starke Säuren und Basen:

pH-Wert starke Säuren:

Starke Säuren zerfallen nahezu vollständig in H_3O^+ und A_{ion}^- :
 $\text{pH} = -\log(\text{Wertigkeit} \cdot [\text{Säure}])$

Bsp.: Berechnung von 0,01- molarer Salzsäure:

$$c(\text{H}_3\text{O}^+) = 0,01 \text{ mol/l} \\ \rightarrow \text{pH} = -\log(0,01) = 2$$

pH-Wert starke Basen:

Starke Basen (v.a. Arrheniusbasen) zerfallen in H_2O vollständig in ihre Ionen

$$\text{pOH} = -\log(\text{Wertigkeit} \cdot [\text{Base}])$$

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH}$$

Bsp.: Berechnung von 0,1- molarer Natronlauge

$$c(\text{OH}^-) = 0,1 \text{ mol/l} \rightarrow \text{pOH} = -\log(0,1) = 1$$

$$\text{pH} = 14 - 1 = 13 \rightarrow c(\text{H}_3\text{O}^+) = 10^{-13} \text{ mol/l}$$

10.4 pH-Wert schwache Säuren und Basen:

pH-Wert schwache Säuren:

$$\text{pH} = \frac{1}{2} \cdot (\text{p}K_{\text{Säure}} - \log(\text{Wertigkeit} \cdot [\text{Säure}]))$$

Bsp.: Essigsäure CH_3COOH

pH-Wert schwache Basen:

$$\text{pOH} = \frac{1}{2} \cdot (\text{p}K_{\text{Base}} - \log(\text{Wertigkeit} \cdot [\text{Base}]))$$

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH}$$

Bsp.: Acetat CH_3COO^-

10.5 pH-Wert von Salzen

Enthält ein Salz als Anion die korrespondierende Base zu einer schwachen Säure, reagiert das Salz wie eine schwache Base.

Enthält ein Salz als Kation eine korrespondierende Säure zu einer schwachen Base, reagiert es wie eine schwache Säure.

Beispiel:

gegeben: 0,1M KCN mit $pK_{S(\text{HCN})} = 9,4$. Welchen pH-Wert hat KCN in wässriger Lösung?

Da der pK_S -Wert von HCN gegeben ist, das Salz aber in K^+ und CN^- zerfällt, muss man zunächst den pK_B -Wert ausrechnen: $pK_B = 14 - pK_S = 14 - 9,4 = 4,6$

Daraus kann man sich nun den pH-Wert (schwache Base) berechnen:

$$pH = 14 - \frac{1}{2} * (4,6 - \log(0,1)) = 11,2$$

Enthält ein Salz eine schwache Base und eine schwache Säure, so gilt:

$$pH = \frac{pK_{\text{Säure1}} + pK_{\text{Säure2}}}{2}$$

Ein Salz einer starken Säure mit einer starken Base reagiert in Wasser neutral
→ NaCl

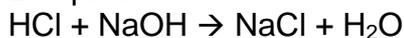
Ein Salz einer schwachen Säure und einer starken Base reagiert in Wasser alkalisch → Na-Acetat

Ein Salz einer starken Säure und einer schwachen Base reagiert in Wasser sauer → NH_4Cl

10.6 Neutralisation:

Gibt man eine Säure und eine Base zusammen, so reagieren diese miteinander. Es entsteht ein Salz und Wasser. So kann man eine Säure oder eine Base neutralisieren, indem man äquivalente Mengen von Säure und Base schafft. Es entsteht eine neutrale Salzlösung mit $pH=7$.

Beispiel:



10.7 Titration

Bei der Titration nutzt man die Neutralisationsreaktion aus, um die Konzentrationen von Säuren und Basen zu bestimmen.

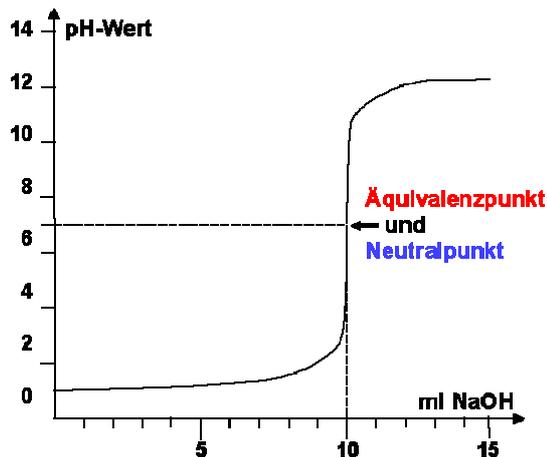
Man stellt eine **Titrationsskurve** auf. Darin bestimmt man die Veränderung des pH-Wertes während der Zugabe der Base. Der Punkt, bei dem man eine bestimmte Stoffmenge Säure mit der entsprechenden Stoffmenge Base neutralisiert hat, nennt man Äquivalenzpunkt.

Titration einer starken Säure mit einer starken Base:

gibt man eine äquivalente Menge (gleiche Konzentration) von einer starken Base zu einer starken Säure, so neutralisieren sich diese ($pK_{\text{Säure}} = pK_{\text{Base}}$). Die Lösung hat hier einen pH-Wert von 7. Somit ist der Äquivalenzpunkt gleich dem Neutralpunkt.

$$\text{Hier gilt: } n_{\text{Säure}} = n_{\text{Base}} \quad \Rightarrow \quad n = c \cdot v \quad \Rightarrow \quad c_{\text{Säure}} \cdot v_{\text{Säure}} = c_{\text{Base}} \cdot v_{\text{Base}}$$

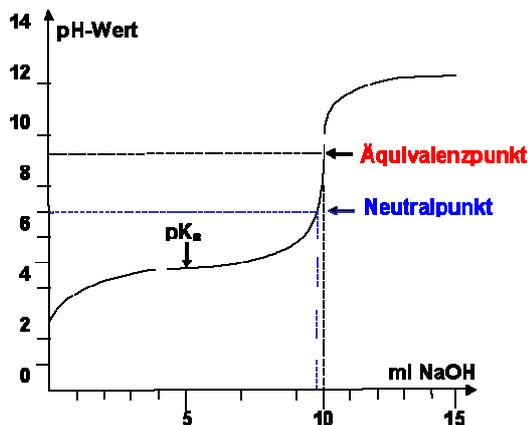
Beispiel: 10 ml 0.1 M HCl mit 0.1 M NaOH



Titration einer schwachen Säure mit einer starken Base:

Schwache Säuren und starke Basen reagieren sich gegenseitig ab. Auch sie zerfallen fast vollständig in Salz und Wasser. Bei dieser Reaktion liegt der Äquivalenzpunkt im basischen. Durch die Titration wird dieser bestimmt.

Beispiel: 10 ml 0.1 M HOAc mit 0.1 M NaOH



11 Puffer

Ein Puffer besteht aus einer schwachen Säure und ihrer korrespondierenden Base in einer wässrigen Lösung. Ziel des Puffersystems ist es, den pH-Wert möglichst stabil zu halten, auch bei Zugabe von H_3O^+ -Ionen oder -Ionen. Der pH-Wert bleibt so lange fast gleich, bis das Salz komplett verbraucht ist.

Ein Puffer wirkt gegen H_3O^+ und OH^- Ionen gleich gut, wenn gilt:

$$[\text{ Säure }] = [\text{ Base }] \Rightarrow \text{ dann gilt: } pH = pK_{\text{Säure}}$$

Aus dem $K_{\text{Säure}}$ -Wert kann man nun den pH-Wert berechnen:

$$K_{\text{Säure}} = \frac{[\text{ Base }] * [H_3O^+]}{[\text{ Säure }]} \quad \square \quad K_{\text{Säure}} * \frac{[\text{ Säure }]}{[\text{ Base }]} = [H_3O^+]$$

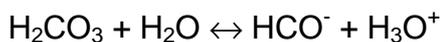
Aus $[H_3O^+]$ lässt sich nun der pH-Wert berechnen:

$$pH_{\text{ Puffer }} = pK_{\text{Säure}} - \log \frac{[\text{ Säure }]}{[\text{ Base }]}$$

Beispiel anhand eines äquimolaren 0,1 M Ammonium-Puffers

<p>Volumen der Lösung: 1 Liter Volumen + Konzentration der zugegebenen HCl-Lösung: 5 ml 1 M HCl => Anfangs-pH-Wert= 9,2</p> <p>Äquimolarer 0,1M Ammoniak-Puffer= Konzentration der Säure und der korrespondierenden Base je 0,05 M</p>	<p>-> Stoffmenge der zugegebenen H₃O⁺-Ionen: $n(H_3O^+ \text{-zugegeben}) = 0,005 \text{ mol}$ gesucht ist nun der pH-Wert nach der Säurezugabe: $\text{pH} = \text{pK}_s - \log \frac{[\text{Säure}]}{[\text{Base}]}$</p> <p>$[\text{Säure}] = 0,5 \text{ mol/l}$ (Angangswert) + 0,005 mol/l (Zugabe der Säure) $[\text{Base}] = 0,5 \text{ mol/l}$ (Anfangswert) - 0,005 mol/l (Säure reagiert in Reaktion ab, entsteht Basen)</p> <p>$\text{pH} = 9,2 - \log (0,055 / 0,045) = 9,1$</p>
---	--

Puffer im Blut: **Kohlensäurepuffer**



Kohlensäure ↔ Bicarbonat

(Kohlensäure ist nicht beständig, zerfällt in CO₂ und H₂O)

$$\text{pK}_{\text{Säure}}(37^\circ\text{C}) = 6,1 \Rightarrow \text{pH} = 6,1 - \log \frac{[\text{CO}_2]}{[\text{HCO}_3^-]}$$

11.1 Pufferkapazität:

Auch bei Verdünnung einer Lösung bleibt das Verhältnis von Basenkonzentration zu Säurenkonzentration gleich, d.h. der pH-Wert ändert sich nicht. Was sich ändert ist jedoch die Kapazität: Nur so lange, wie die Konzentration von Base und Säure ähnlich ist, kann ein Puffer wirksam sein. Ist die Base durch Zugabe von H₃O⁺ komplett zur Säure geworden, ist die Pufferkapazität verbraucht. Danach steigt der pH-Wert wieder an.

Pufferkapazität entspricht also der Menge an Säure / Base, die man zugeben muss, um den pH-Wert eines Liters der Pufferlösung um eins zu verändern.

Weitere Puffersysteme:

Acetatpuffer CH₃COOH / CH₃COO⁻

Ammoniakpuffer NH₄⁺ / NH₃

Phosphatpuffer H₂PO₄⁻ / HPO₄²⁻ (intrazellulär und im Harn)

Proteinpuffer im Plasma

Besonders wichtig in der Medizin ist das Blutpuffersystem. Der physiologische pH-Wert beträgt zwischen 7,36 und 7,44. Alle Stoffwechselfvorgänge sind von diesem Milieu abhängig. Schon kleinste Schwankungen wären lebensbedrohlich und würden zu Atem- und Kreislaufstillstand führen. Bei einem pH-Wert unter 7,36 spricht man von einer Azidose (Säuren sind Azide), über dem pH-Wert von 7,44 von einer Alkanose (Basen sind alkalisch).

12 Funktionelle Gruppen

12.1 Kohlenwasserstoffverbindungen

Alle organischen Verbindungen beruhen auf einem Kohlenstoffgrundgerüst. Aus diesem Grunde muss man zuerst dieses Gerüst verstehen.

Kohlenstoff (C im Periodensystem) ist ein vierbindiges Atom, das heißt es stellt vier Elektronen für jeweils eine Bindung zur Verfügung. Es kann also vier Atome binden, wie zum Beispiel Wasserstoff (H im Periodensystem), oder auch Mehrfachbindungen mit benachbarten Atomen bilden (dadurch können weniger Atome insgesamt gebunden werden).

Das Kohlenstoffgerüst ist chemisch kaum reaktiv. Das bedeutet, es wird durch die funktionellen Gruppen maßgeblich in seinen Eigenschaften bestimmt. Ohne funktionelle Gruppen ist eine Kohlenstoffkette apolar und dadurch hydrophob. Nur schwache intermolekulare Kräfte, die Van-der-Waals-Kräfte, bilden sich aus. Aus diesem Grunde sind auch die Siedetemperaturen besonders niedrig. Diese steigen jedoch mit der Kettenlänge an, da zunehmend mehr intermolekulare Kräfte wirken.

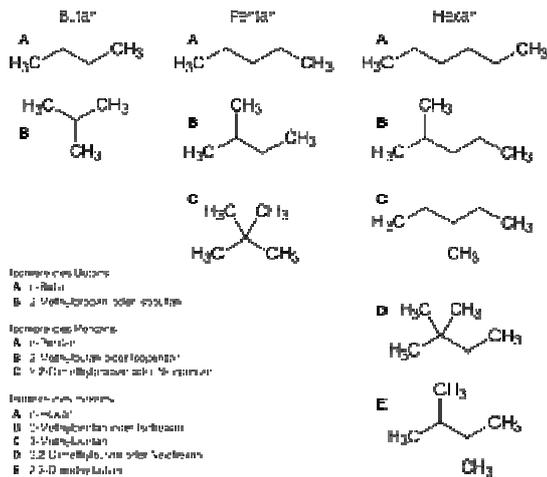
Die Kohlenstoffketten lassen sich nach ihrer Länge, Anzahl der Bindungen zwischen den einzelnen C-Atomen und einer eventuellen Ringbildung einteilen. Es ist sinnvoll zuerst die sich aus der Länge der Kohlenstoffatome ergebende Nomenklatur zu betrachten. Ein Molekül aus einem einzelnen C-Atom, das 4 H-Atome bindet, heißt Methan. Zwei C-Atome mit je 3 H-Atomen nennt man Ethan, ab drei C-Atomen spricht man von Propan. So lässt sich jede Kohlenstoffkette nach der der Anzahl ihrer Kohlenstoffatome charakterisieren.

Namen der Alkane nach der Kettenlänge:

1	Methan	CH ₄	7	n-Heptan	C ₇ H ₁₆
2	Ethan	C ₂ H ₆	8	n-Octan	C ₈ H ₁₈
3	Propan	C ₃ H ₈	9	n-Nonan	C ₉ H ₂₀
4	n-Butan	C ₄ H ₁₀	10	n-Decan	C ₁₀ H ₂₂
5	n-Pentan	C ₅ H ₁₂	11	n-Undecan	C ₁₁ H ₂₄
6	n-Hexan	C ₆ H ₁₄	12	n-Dodecan	C ₁₂ H ₂₆

Ab Butan können die Ketten linear oder verzweigt verlaufen. Man spricht dann von Konstitutionsisomeren, wenn die Summenformel gleich ist, aber die Strukturformeln sich unterscheiden.

Konstitutionsisomere von Butan, Pentan und Hexan:



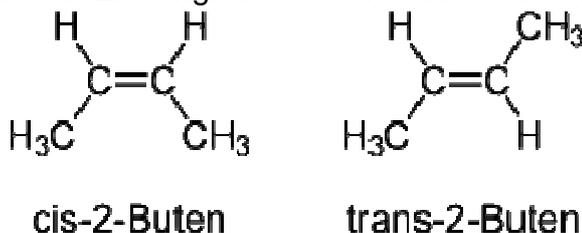
Wichtig ist, dass zwischen den verbindenden Elektronenpaaren sich immer ein maximal weiter räumlicher Abstand einstellt. Beim Methan bedingt dies die räumliche Struktur eines Tetraeders. Das heißt alle vier H-Atome des Moleküls sind so positioniert, dass sich zwischen ihnen ein Winkel von je $109,5^\circ$ einstellt. Dieser Winkel ist energetisch am günstigsten. Freibewegliche Kohlenstoffverbindungen ordnen sich stets nach diesem Winkelmaß an, auch wenn die Kette sich in einem Ring schließt (siehe „Sesselform“)

Zur weiteren Differenzierung zwischen verschiedenen Kohlenwasserstoffketten können die Bindungen innerhalb der Kette betrachtet werden. Sind alle C-Atome der Kette durch Einfachbindungen mit dem Nachbarkohlenstoffatom verbunden, spricht man von **Alkanen**. Sobald eine Doppelbindung auftritt, handelt es sich um ein **Alken**. **Alkine** haben hingegen zumindest eine Dreifachbindung.

Entlang dieser Einteilung ändert sich auch der Suffix des Namens der entsprechenden Kette. So endet ein Alkan immer auf „-an“, ein Alken auf "-en" und Alkine auf "-in". Zum Beispiel heißt ein Molekül bei dem zwei C-Atome mit einer Doppelbindung verbunden sind, Ethen. Die Nomenklatur lässt sich wie bei den Alkanen durchdeklinieren. Ein Molekül mit mindestens einer Doppelbindung nennt man ungesättigt (siehe Fette in der Biochemie).

Doppelbindungen sind räumlich nicht mehr frei drehbar wie die Einzelbindungen der Alkane. Es ergeben sich dadurch geometrische Isomere ab einer Kettenlänge von vier C-Atomen (Buten). Ein Cis-Isomer liegt vor, wenn die H-Atome, die über eine Doppelbindung verbundenen C-Atome, auf einer "Seite" der Doppelbindung liegen. Liegen die H-Atome auf gegenüberliegenden "Seiten", spricht man von Trans-Isomeren.

Cis- beziehungsweise Trans-Isomer von Buten:

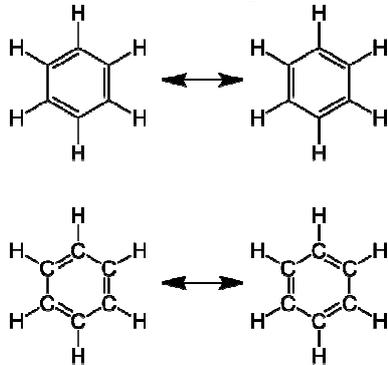


Liegen mehrere Doppelbindungen innerhalb eines Moleküls vor, spricht man von Polyenen. Hier wird zwischen konjugierten und nicht konjugierten

Doppelbindungen unterscheiden. Bei den konjugierten wechseln sich Doppel- und Einfachbindungen regelmäßig ab.

Eine Sonderstellung nehmen die Aromaten (mehrfach ungesättigte cyclische Kohlenwasserstoffe) ein. Konjugierte Doppelbindungen liegen hier delokalisiert vor, das heißt die Elektronen der Doppelbindungen sind räumlich nicht genau festzulegen.

Konjugierte Doppelbindungen des Benzolrings:

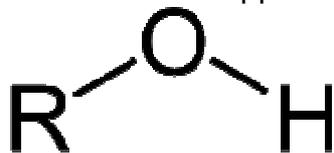


12.2 Alkohole, Phenole

Alkohole sind Alkane mit einer **Hydroxyl-Gruppe (OH-Gruppe)**. Diese Gruppe besteht aus einem Sauerstoffatom (O im Periodensystem) und einem Wasserstoffatom.

Alle Alkohole sind durch den Suffix „-ol“ am Ende des Namens gekennzeichnet.

Funktionelle Gruppe des Alkohols:

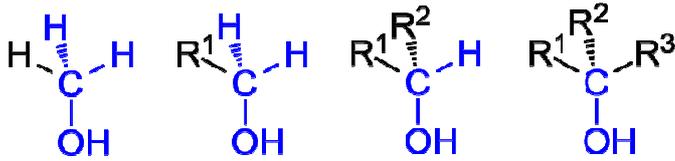


Aufgrund des Elektronegativitätsunterschiedes zwischen Wasserstoff und Sauerstoff bildet sich eine polare Bindung aus. Das O-Atom „zieht“ also die Bindungsatome näher zu sich heran, wodurch ein positiver Pol und ein negativer innerhalb des Moleküls entstehen. Dadurch können sich Wasserstoffbrückenbindungen intermolekulär ausbilden. Die Folge sind ein Ansteigen der Siedetemperatur, vermehrte Wasserlöslichkeit und Fettunlöslichkeit.

Je nach Anzahl der angegliederten OH-Gruppen, spricht man von einwertigen, beziehungsweise mehrwertigen Alkoholen (Bsp.: Glycerin, beziehungsweise Glycerol).

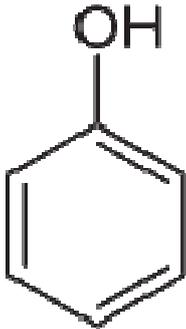
Eine weitere formale Differenzierung lässt sich durch die Anzahl der benachbarten C-Atome des Kohlenstoffatoms, welches die OH-Gruppe „trägt“, machen. Bei einem primären Alkohol hat das Kohlenstoffatom mit der OH-Gruppe eine oder keine Bindung zu einem weiteren C-Atom. Ein sekundärer Alkohol hat folgerichtig zwei C-Atome und der tertiäre Alkohol drei C-Atome in der Nachbarschaft des OH-beladenen Kohlenstoffatoms.

Von links nach rechts: die ersten beiden Strukturen sind primäre Alkohole, dann folgt ein sekundärer und tertiärer Alkohol:



Phenole sind ringförmige Alkohole, das heißt sie bestehen aus einem Benzolring der einen oder mehrere OH-Gruppen trägt. Anders formuliert also eine oder mehrere Hydroxylgruppen mit aromatischem Rest. Sie reagieren in Wasser schwach sauer und geben ein Proton ab, obwohl sie die gleiche funktionelle Gruppe wie die Alkohole tragen.

Strukturformel des Phenols:



12.3 Thiole

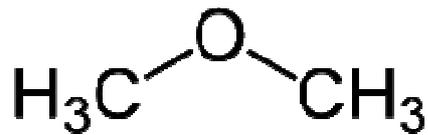
Thiole sind Verbindungen mit einer SH-Gruppe (S steht für Schwefel im Periodensystem), gekennzeichnet durch den Suffix „-thiol“. Da S- und O-Atome in der gleichen Hauptgruppe stehen, ähneln die Eigenschaften der Thiole denen der Alkohole. Jedoch ist der Dipol aus SH schwächer (da der Elektronegativitätsunterschied nicht so hoch ist) als der der Hydroxylgruppe. Das heißt das die Siedetemperatur und Wasserlöslichkeit sind höher als bei den Alkanen, liegen aber unter denen der Alkohole. Außerdem reagieren sie in Wasser saurer, da das S-Atom das H-Atom weniger fest bindet.

Typische Reaktionsformen sind die Oxidation zu Disulfiden, bei denen sich zwei Thiole über eine Disulfidbrücke verbinden, oder die Ausbildung von Thioethern (= Sulfide). Thioether entsprechen in ihrem Aufbau den Ethern, allerdings lässt sich das verbindende S-Atom weiter oxidieren. Dabei entstehen durch die Aufnahme von Sauerstoffatomen erst Sulfoxide und dann Sulfone.

12.4 Ether

Ether sind formal eine Verbindung aus zwei Alkoholen. Durch Wasserabspaltung entsteht das strukturgebende Element – die Sauerstoffbrücke. Es wird zwischen symmetrischen, asymmetrischen und cyclischen Ethern unterschieden. Bei den symmetrischen Ethern stehen auf beiden Seiten des O-Atoms gleich viele C-Atome, umgekehrt verhält es sich bei den asymmetrischen. Bei cyclischen Ethern sind O-Atome in Kohlenstoffringe „eingebaut“.

Strukturformel eines Dimethylether:

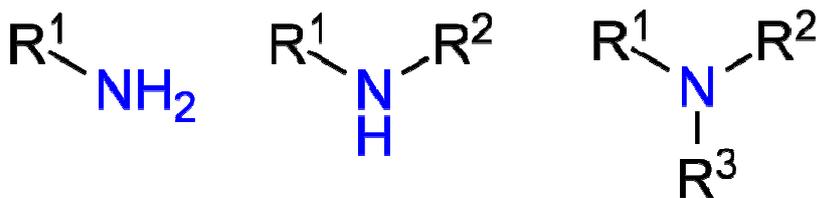


Da kein Wasserstoff mehr an das O-Atom gebunden ist, sondern nur C-Atome, gibt es auch keine Wasserstoffbrückenbindungen. Folglich sind die Siedepunkte niedrig (im Bereich der Alkane) und Ether wasserunlöslich.

12.5 Amine

Amine sind Stickstoffverbindungen (N im Periodensystem), die sich vom **Ammoniak** (NH_3) ableiten. Jedoch sind die H-Atome durch organische Reste eingetauscht. Wurde nur ein H-Atom eingetauscht, spricht man von primären Aminen; ab zwei eingetauschten H-Atomen, von sekundären, und bei drei organischen Resten, von tertiären Aminen. Ihre Namen tragen den Präfix „Amino-“, oder den Suffix „-amin“.

Von links nach rechts: primäres, sekundäres und tertiäres Amin:



Amine sind wegen ihrer polaren Gruppe besser wasserlöslich als Alkane. Intermolekulare Kräfte spielen vermehrt eine Rolle, wodurch die Siedetemperatur steigt.

Amine sind basisch. Sie haben ein freies Elektronenpaar, an dem ein Proton gebunden werden kann. Dadurch entstehen in Verbindung mit Wasser Hydroxidionen (OH^-). Je mehr organische Reste am Stickstoff gebunden sind, desto basischer reagiert das Molekül. Der pKB (Stärke einer Base; je niedriger, desto stärker) sinkt also von primären zu tertiärem Amin stetig ab.

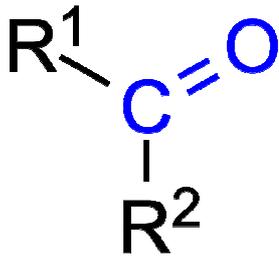
Eine Ausnahme bilden hier Amine mit aromatischen Resten. Die Elektronen verteilen sich über den Ring, wodurch die Elektronendichte am N-Atom sinkt. Dadurch ist die Aufnahmekapazität für Protonen verringert. Das ist auch der Grund für das saure Verhalten der Phenole in Wasser.

12.6 Ketone und Aldehyde

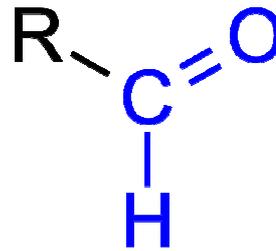
Die funktionelle Gruppe der Aldehyde und Ketone ist die **Carbonylgruppe**, bei der an einem C-Atom ein O-Atom mit einer Doppelbindung gebunden ist. Das C-Atom trägt dabei entweder mindestens ein H-Atom (Aldehyd) oder zwei organische Reste (Keton).

Die Carbonylgruppe entsteht bei der Oxidation von primären und sekundären Alkoholen, wobei aus einem primären Alkohol ein Aldehyd und aus einem sekundären Alkohol ein Keton entsteht. Aldehyde haben den Suffix „-al“, Ketone „-on“.

Strukturformel eines Ketons:



Strukturformel eines Aldehyds:

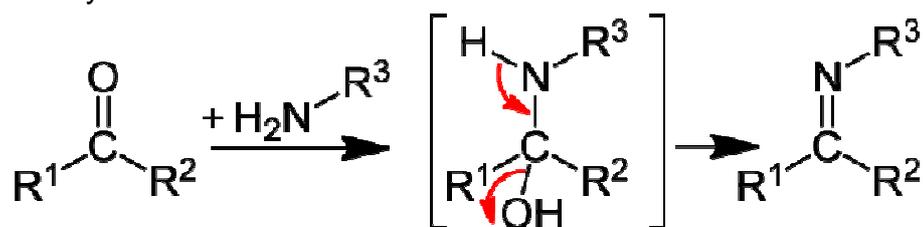


Es handelt sich auch hier um polare Gruppen, die allerdings keine Wasserstoffbrückenbindungen ausbilden können, sondern nur Dipol-Dipol-Wechselwirkungen. Damit liegt der Siedepunkt unter dem der Alkohole, außerdem nimmt die Wasserlöslichkeit mit der Länge des Alkylrestes ab (ca ab sechs C-Atomen wasserunlöslich). Über die Polymerisation lassen sich Monomere zu Polymeren aneinanderfügen, diese kennen wir aus dem Alltag als Kunststoffe.

12.7 Schiff'sche Basen

Die Schiff'schen Basen (oder **Imine**) sind Verbindungen bei denen das O-Atom eines Aldehyds oder Ketons durch ein Stickstoffatom ersetzt ist, welches einen organischen Rest trägt. Das Sauerstoffatom wird bei dieser Reaktion in Form von Wasser abgestoßen. Sie sind weniger basisch als Amine, da der Stickstoff weniger empfänglich für Protonen ist. Die Bildung einer Schiff'schen Base ist eine reversible Reaktion. Sie tritt häufig als Zwischenschritt bei enzymatischen Reaktionen oder bei der Bindung eines Coenzymen an ihr Apoenzym auf.

Iminsynthese aus einem Keton:



12.8 Carbonsäuren

Die funktionelle Gruppe der Carbonsäuren ist die **Carboxylgruppe** (-COOH), die bei der Oxidation von Aldehyden entsteht. Der gebräuchliche Suffix ist „-säure“. Ab einer Kohlenstoffkettenlänge von 4 Atomen spricht man von Fettsäuren. Viele Carbonsäuren haben Trivialnamen, die sich vom Vorkommen der Säure ableiten. Beispiele sind Ameisensäure (Methansäure), Essigsäure (Ethansäure) und Salicylsäure (Hydroxybenzolcarbonsäure).

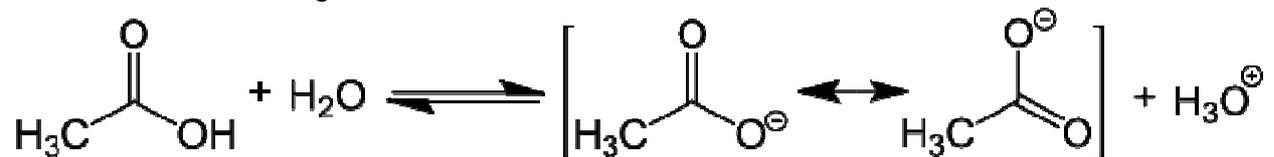
Die Carbonsäuren lassen sich weitergehend nach der Anzahl ihrer COOH-Gruppen klassifizieren. Eine Monocarbonsäure trägt eine COOH-Gruppe, dementsprechend tragen Di- beziehungsweise Tricarbonsäuren zwei bis drei COOH-Gruppen.

Um die C-Atome zu nummerieren beginnt man immer mit 1 an der Carboxylgruppe oder mit α am C-2-Atom (dann β für C-3 etc) und endet mit ω am letzten C-Atom.

Da es sich auch hier um polare Gruppen handelt, sind Carbonsäuren wasserlöslich und lipophob. Jedoch nimmt die Wasserlöslichkeit mit Zunahme des Alkylrestes ab (ab C 8 praktisch wasserunlöslich). Die Siedetemperatur liegt über der der Alkohole, da COOH-Gruppen untereinander zwei Wasserstoffbrückenbindungen ausbilden können.

Die Azidität der Carbonsäuren hängt von den benachbarten Strukturen ab. Senken diese die Elektronendichte an der COOH-Gruppe, zum Beispiel durch eine starke Elektronegativität, kann ein Proton leichter abgegeben werden. Das heißt das Molekül reagiert saurer. Dies bezeichnet man als induktiven Effekt (I-Effekt). Alkylreste haben einen +I-Effekt (=erhöhen Elektronendichte an COOH). Je länger also die Ketten an der Säuregruppe sind, desto schwächer ist diese. Halogenatome (Cl, Br), Hydroxylgruppen, eine weitere Carboxylgruppe oder ein Amin üben einen -I-Effekt (=senken Elektronendichte an COOH), dadurch reagiert das Molekül saurer.

Dissoziation von Essigsäure in Wasser:



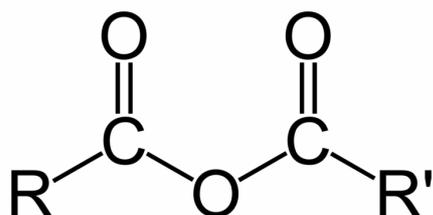
Klassische Reaktionen sind die Salzbildung in Verbindung mit Basen und die Veresterung, bei der eine Carbonsäure mit einem Alkohol unter Wasserabspaltung ein Carbonsäureester bildet.

12.9 Reaktionstypen

Einführend sollte man sich über die Begriffe **Kondensation** und **Hydrolyse** klar werden. Eine Kondensation beschreibt eine Reaktion bei der sich Moleküle verbinden unter der Abspaltung von Wasser. Die Hydrolyse ist das Gegenteil, das heißt es wird ein Molekül unter „Wassereinbau“ gespalten.

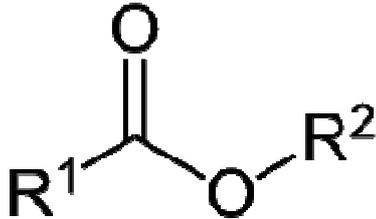
Bei einem **Säureanhydrid** handelt es sich um eine Verbindung zweier Säuren unter Abspaltung von Wasser. Das verbindende Element ist eine energiereiche Sauerstoffbrücke, wie sie zum Beispiel bei ATP zu finden ist.

Strukturformel eines Säureanhydrids:



Eine Esterbindung ist eine Verbindung eines Alkohols und einer Säure. Hier wird ebenfalls Wasser abgespalten und eine Sauerstoffbrücke ausgebildet. Ein Beispiel hierfür sind die Triacylglycerine, bei denen drei Fettsäuren an die Hydroxylgruppen des Glycerins gebunden sind. Thioester sind den Estern sehr ähnlich, allerdings ist das O-Atom des Alkohols gegen ein Schwefelatom (siehe Thiole) eingetauscht.

Strukturformel eines Carbonsäureesters:



Neben den Redoxreaktionen gibt es noch andere, nachstehend erklärte, Reaktionsformen, die in der organischen Chemie eine wichtige Rolle spielen. Bei der Additionsreaktion handelt es sich um eine Anlagerung von einem Molekül an ein anderes, ohne jegliche Abspaltung von Teilchen. Diese Form ist typisch für Moleküle mit einer Doppelbindung (Alkene, Aldehyde oder Ketone), da die Doppelbindung energetisch weniger stabil ist, als eine Einfachbindung. Es lassen sich drei Grundtypen differenzieren - elektrophile, nukleophile und radikalische Additionsreaktionen.

Ebenfalls gesondert sollten die Substitutionsreaktionen betrachtet werden. Dabei wird ein Teil eines Moleküls gegen ein anderes ausgetauscht. Diese Reaktion ist typisch für die Aromaten. Auch hier lassen sich die oben genannten drei Grundformen differenzieren (elektrophile, nukleophile und radikalische Substitution).

Die Eliminierung ist eine Reaktion, bei der Teilchen aus einem Molekül abgespalten werden. Allerdings werden diese Teilchen nicht ersetzt, somit könnte man die Eliminierung als Umkehr der Addition betrachten. Sie ist klassisch für die Alkane und Alkohole, bei denen dann häufig wieder Doppelbindungen entstehen.

Die letzte Reaktionsform ist die Umlagerung. Hierbei tauschen Atome in einem Molekül die Position. Die Eigenschaften des Moleküls ändern sich dadurch teilweise grundlegend.

13 Quellen:

13.1 Atombau, Periodensystem, Isotope

- Chemie für Mediziner (Axel Zeeck) Urban & Fischer Verlag/Elsevier GmbH; Auflage: 7 (15. März 2010)
- Biochemie des Menschen (Florian Horn) Thieme, Stuttgart; Auflage: 4., aktualisierte und erweiterte Aufl. (23. September 2009)
- <http://www2.chemie.uni-erlangen.de/projects/vsc/chemie-mediziner-neu/pse/aufbau.html>

13.2 Chemische Bindungen, Aggregatzustände, Zwischenmolekulare Anziehungskräfte Chemische Reaktionen

- Chemie für Dummies (John T. Moore) Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA; Auflage: 2. überarbeitete Auflage (10. Juni 2008)
- Skript des Vorsemesters für Mediziner aus dem RBZ Köln
- Wikipedia – Die freie Enzyklopädie (www.wikipedia.de)
- Chemie Homepage ITam (<http://www.itam.lu/chimie/indexCD.html>)
- <http://www2.chemie.uni-erlangen.de/projects/vsc/chemie-mediziner-neu/pse/aufbau.html>
- <http://de.wikipedia.org/wiki/Mengenelement>
- www2.chemie.uni-erlangen.de/projects/vsc/chemie-mediziner-neu/bindung/bilder/sp3_orbitale.gif&imgrefurl

13.3 Säuren und Basen

- Abbildung zu pH-Werten: : Schatz *et al.* - Erste Hilfe – Physik und Chemie für Mediziner
- Abbildung zu Titrations: Quelle <http://www.chemie.uni-erlangen.de/mediziner/praktikum/heft-neu/medprak-heft-04.html#403>
- Zeeck *et al.* - Chemie für Mediziner
- Horn - Biochemie des Menschen: Das Lehrbuch für das Medizinstudium
- Skript des Vorsemesters Medizin am Rheinischen Bildungszentrum, Köln
- Mortimer *et al.* - Chemie, Das Basiswissen der Chemie
- Schatz *et al.* - Erste Hilfe – Physik und Chemie für Mediziner

13.4 Funktionelle Gruppen

- „Basics Chemie“, Sandra Meyer *et al.*, Elsevier, 1. Auflage September 2010
- „Chemie für Mediziner“, Axel Zeeck *et al.*, Elsevier, 6. Auflage 2005
- „Basics Biochemie“, Hanni Kirchner und Julia Mühlhäuser, Elsevier, 1. Auflage 2009

-
- „Duale Reihe Biochemie“, Joachim Rassow et al., Thieme, 2. Auflage 2008
 - „Biochemie des Menschen“, Florian Horn, Thieme, 4. Auflage
 - „Das Basiswissen der Chemie“, Charles E. Mortimer et al., Thieme, 9. Auflage 2007
 - Folien zu den Chemievorlesungen, Andreas Savelsbergh, Wintersemester 2011/12
 - Alle Abbildungen sind von www.wikipedia.de und ohne Copyright-Ansprüche

14 Autoren:

Maximilian Buttenberg		Funktionelle Gruppen
Maria Hendrich:	-	Atombau
	-	Das Periodensystem der Elemente
	-	Radioisotope
Markus Roskopf:	-	Chemische Bindungen
	-	Aggregatzustände
	-	Zwischenmolekulare Anziehungskräfte
	-	Chemische Reaktionen
Ann-Kathrin Singer		Thermodynamik Chemischer Reaktionen
Tabea Zapf		Säuren und Basen
		pH-Wert
		Puffer

