

## 2.01

## Schmelz- und Siedepunkte von typischen reinen Stoffen

	Salzartig Ionengitter (NaCl) <sub>∞</sub>	Diamantartig Atomgitter (CaF <sub>2</sub> ) <sub>∞</sub> (Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>∞</sub>	Flüchtige Stoffe diskrete Moleküle CH <sub>4</sub> C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> CCl <sub>4</sub> CO <sub>2</sub>			
Schmelzpunkt [°C]	803	1378 2050	-183	5.5	-23	-57 (5.2 bar)
Siedepunkt [°C]	1403	2500 3000	-162	80	77	-50 (5.2 bar)
	starker Zusammenhalt im Kristall		geringe Wechselwirkung der Teilchen			

## 2.02

## Symbolik der Elektronenpaarbindung

Summenformel	1 Valenzelektronenpaar = 2 Punkte → "Punktformeln" (veraltet)	1 Valenzelektronenpaar = Strich → mit allen Valenzelektronenpaaren (= bindende + nichtbindend)	"Valenzstrich-Formeln" nur mit bindenden Valenzelektronenpaaren
NaCl	Na <sup>⊕</sup> :Cl:⊖	Na <sup>⊕</sup>  Cl ⊖	Na <sup>⊕</sup> Cl <sup>⊖</sup>
HCl	H :Cl:	H-Cl	H-Cl
H <sub>2</sub> O	H :O: H	H-O-H	H-O-H
CH <sub>4</sub>	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \vdots \\ \text{H} : \text{C} : \text{H} \\ \vdots \\ \text{H} \end{array}$	$\left[ \begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array} \right]$ veraltet	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array} = \begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array} = \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$

## 2.03

## Charakterisierung von Atomorbitalen (AO's) durch Atomquantenzahlen

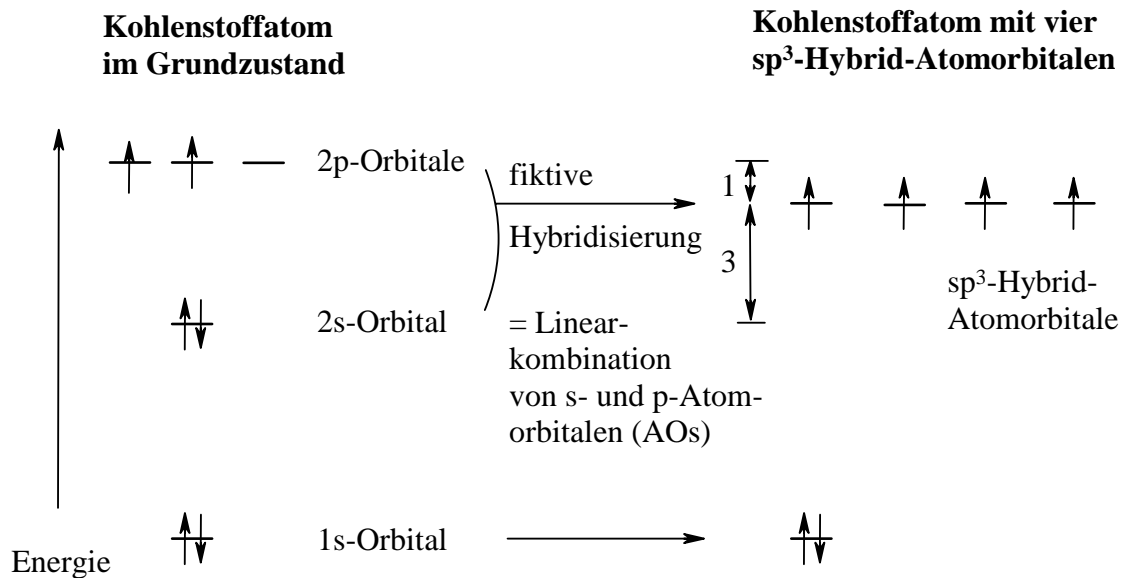
Quantenzahl	Symbol	mögliche Werte	beschreibt
Hauptquantenzahl	$n$	1, 2, 3, 4, ...	Energie
Nebenquantenzahl	$l$	0, 1, 2, ... $n - 1$	räumlichen Bereich
magnetische	$m$	$-l, \dots, 0, \dots, +l$	der Orbitale
Spinquantenzahl		$-1/2, +1/2$	Spin des Elektrons

## Atomorbitale

Energie	Räumlicher Bereich		Spin
Hauptquantenzahl	Neben-quantenzahl	magnetische Quantenzahl	Spinquantenzahl
$n = 1$	$l = 0$ (Orbitaltyp s)	$m = 0$	$+, -1/2$
$n = 2$	$l = 0$ (Orbitaltyp s)	$m = 0$	$+, -1/2$
	$l = 1$ (Orbitaltyp p: $p_x, p_y, p_z$ )	$m = -1, 0, +1$	$+, -1/2$
$n = 3$	$l = 0$ (Orbitaltyp s)	$m = 0$	$+, -1/2$
	$l = 1$ (Orbitaltyp p: $p_x, p_y, p_z$ )	$m = -1, 0, +1$	$+, -1/2$
	$l = 2$ (Orbitaltyp d: $d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}, d_{x^2-y^2}, d_{z^2}$ )	$m = -2, -1, 0, +1, +2$	$+, -1/2$

## Vierfach koordiniertes Kohlenstoffatom

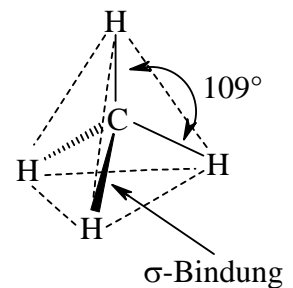
## Beispiel Methan

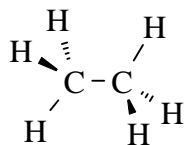
**Modellvorstellung**

Zwischen zwei Atomen lokalisiertes Elektronenpaar

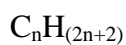


$\sigma$ -Bindung (Elektronenpaarbindung)  
Räumliche Anordnung der vier äquivalenten  
Elektronenpaarbindungen ergibt reguläres Tetraeder



**Kohlenwasserstoffe**

Alkane  
(Paraffine)

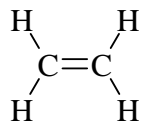


Kapitel

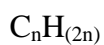
3, 4

davon  
abgeleitet

Kapitel



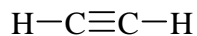
Alkene  
(Olefine)



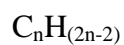
5

**Aliphatische Verbindungen**

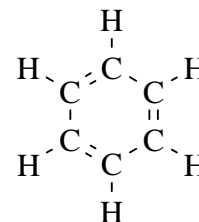
7 - 12



Alkine  
(Acetylderivate)



6



Aromaten  
(Benzolderivate)


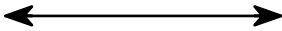

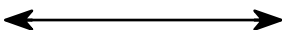
13

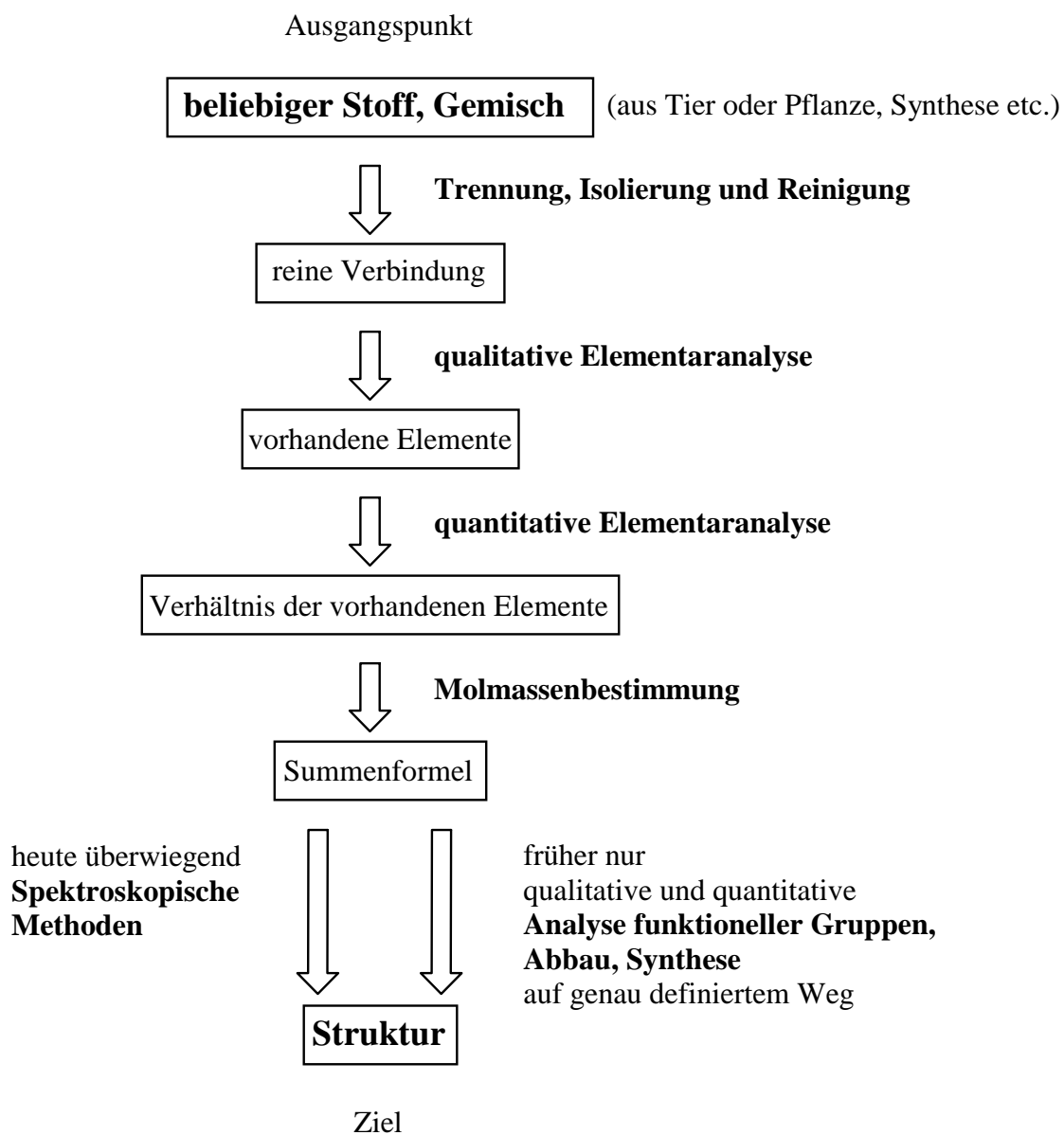
**Aromatische Verbindungen**

14, 15

**Struktur von Molekülen**

vier Ebenen:

Summenformel		Vorhandene Elemente, Verhältnis der Atome, Molmasse
Konstitution		Reihenfolge der Verknüpfung der Atome
Konfiguration		Räumliche (sterische) Anordnung der Atome
Konformation		Räumliche Anordnung, die durch Rotation um Einfach- bindung verändert wird

**Bestimmung der Struktur von Molekülen**

**Physikalische Trenn- und Reinigungsmethoden****Einfacher Trenneffekt****Destillation****Sublimation****Kristallisation**

Verteilung zwischen einer festen und einer flüssigen Phase  
(Adsorption, Desorption → Elution).

Verteilung zwischen zwei flüssigen Phasen  
**(Extraktion)**

**Wiederholter Trenneffekt:**

Kolonnen-Destillation

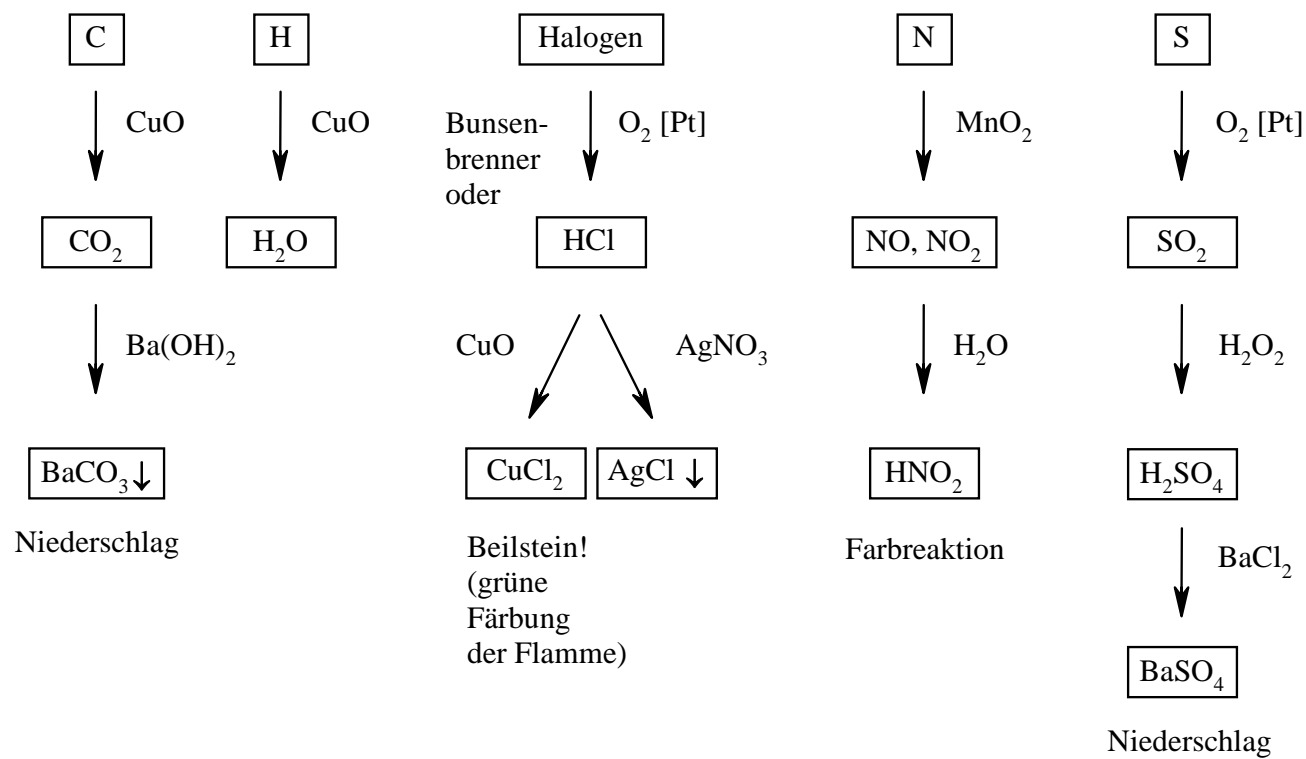
**Chromatographische Methoden** basieren auf der Verteilung eines Stoffes zwischen stationärer und mobiler Phase:

fest/flüssig: Säulen-Chromatographie (SC)  
Dünnschicht-Chromatographie (DC)  
Papier-Chromatographie

flüssig/flüssig: Verteilungs-Chromatographie

flüssig/gasförmig: Gas-Chromatographie (GC)

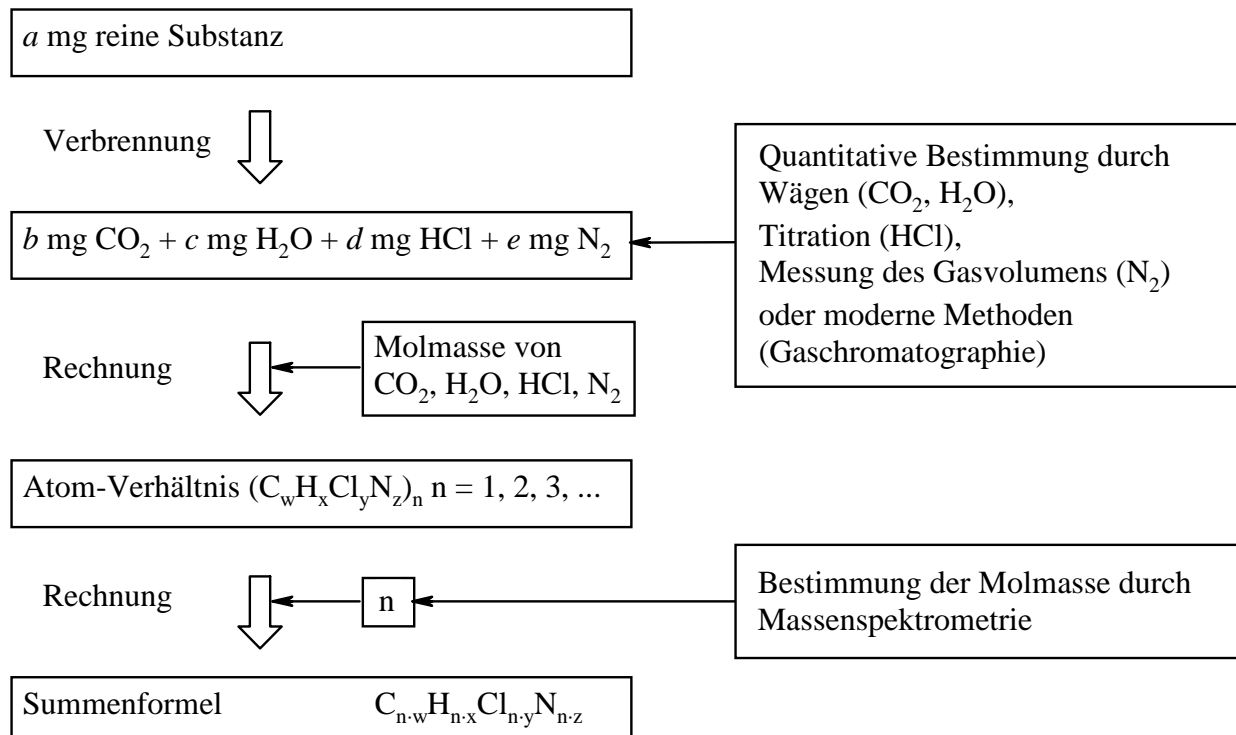
## Qualitative Elementaranalyse





## Bestimmung der Summenformel einer Verbindung

**Qualitative Analyse**  $\longrightarrow$  vorhandene Elemente  
z.B. C, H, Cl, N

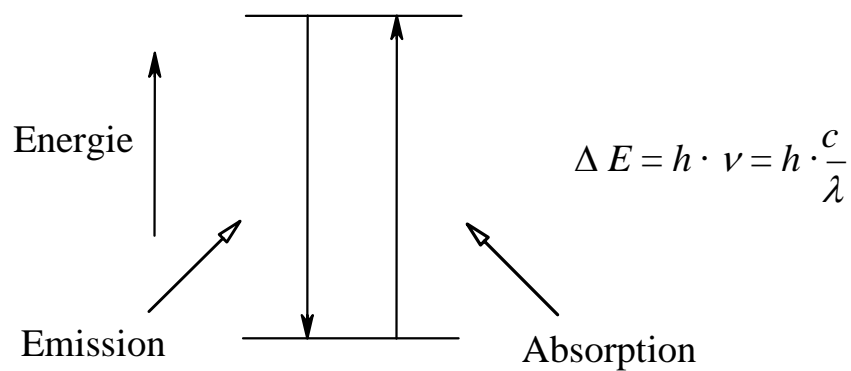
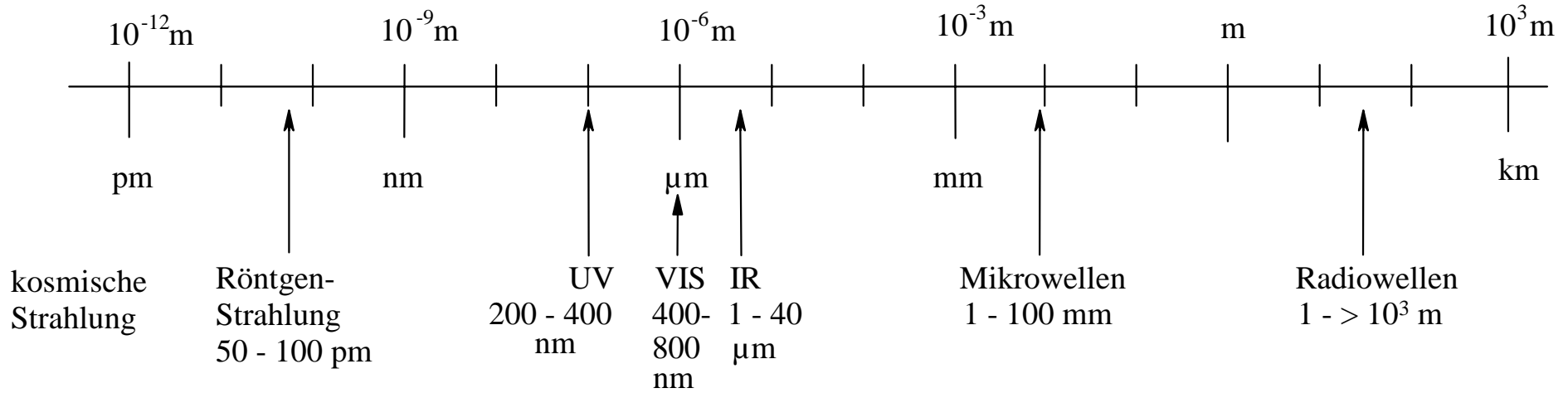
**Quantitative Elementaranalyse**

### Methoden zur Untersuchung der Molekülstruktur

Auf Absorption elektromagnetischer Strahlung beruhen:

UV/VIS-Spektroskopie	IR-Spektroskopie	NMR-Spektroskopie
<b>Anregung</b> der Valenzelektronen	der Atomschwingungen	der Atomkerne mit Kernspin-Quantenzahl $\neq 0$ 1/2 : $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{19}\text{F}$ , $^{31}\text{P}$ , ... 1 : $^2\text{H}$ , $^3\text{H}$ , $^6\text{Li}$ , $^7\text{Li}$ , ... 3/2 etc.
<b>Rückschluß auf</b> Zahl und Anordnung von Doppelbindungen, Heteroatomen und funktionellen Gruppen	funktionelle Gruppen	Art und Zahl gleichartig und unterschiedlich gebundener Atome und ihre gegenseitige Position
<b>Substanzbedarf</b> 1 – 10 mg	1 – 10 mg	1 – 100 mg
<b>Gerätekosten</b> 25.000 – 200.000 Euro	20.000 – 200.00 Euro	200.000 – 2.000.000 Euro

Wellenlängen-Bereiche elektromagnetischer Strahlung



$h$  : Planck'sches Wirkungsquantum =  $6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$   
 $c$  : Lichtgeschwindigkeit =  $3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$   
 $\lambda$  : Wellenlänge [m]  
 $\nu$  : Frequenz [Hz]

## Methoden zur Untersuchung der Molekülstruktur (die **nicht** auf Absorption elektromagnetischer Strahlung beruhen)

### Massenspektrometrie

Ionisierung von Molekülen in der Gasphase im Hochvakuum, teilweise Zerfall der Molekül-Ionen in geladene Fragmente, die im Magnetfeld und elektrischen Feld getrennt und danach nachgewiesen werden.

*Rückschluß* auf Molmasse, Summenformel, Strukturteile und funktionelle Gruppen

*Substanzbedarf*: 10 ng

*Gerätekosten*: 200.000 – 1.500.000 Euro

### Röntgenbeugungsanalyse

Nur für kristalline Stoffe, die als **Einkristalle** vorliegen.

Die Atome des Kristallgitters erzeugen ein Beugungsmuster, das analysiert wird.

*Rückschluß* auf gegenseitige Lage und Abstände der Atome. Bei Molekülkristallen Ermittlung der Strukturformel und der genauen räumlichen Anordnung der Atome (Bindungslängen und -winkel).

*Substanzbedarf*: ca. 1 mg

*Gerätekosten*: 300.000 – 1.000.000 Euro