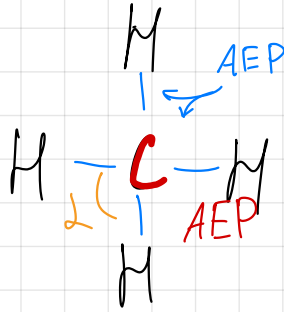


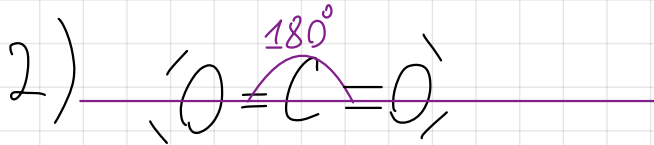

EPA-Theorie: Elektronenpaarabstoßungstheorie

- räumliche Struktur von Molekülen (Was?)
- Abstoßungskräfte zwischen Außenelektronenpaare (AEP) eines zentralen Atoms des Moleküls (Wie?)

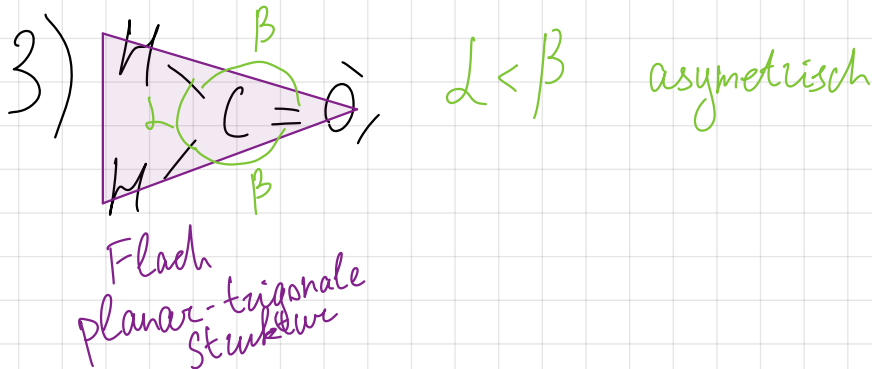
1) Methan CH_4 

Im Raum muss das CH_4 -Molekül einen symmetrischen Tetraeder bilden.

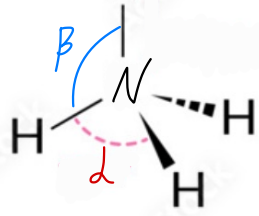
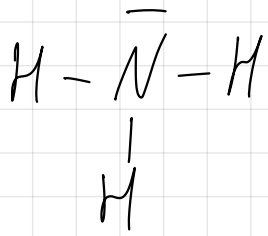
Wegen des kleineren Bindungswinkel in der Pyramide entsteht nicht diese (Pyramide, 4 H unter, 1 C oben) räumliche Struktur für CH_4 , sondern die tetraedrische Bindungsanordnung; dann haben die AEP'e den größten Abstand.



Lineare Struktur
(flach)

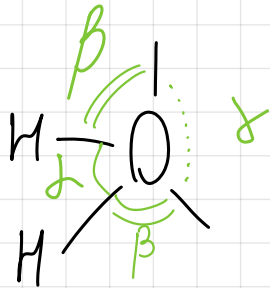
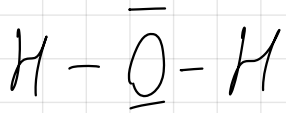
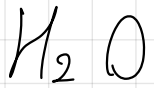


Wenn es am zentralen Atom auch noch freie Elektronenpaare gibt, werden diese wie Bindungen behandelt.



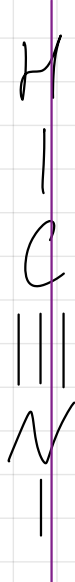
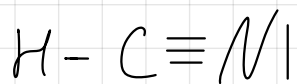
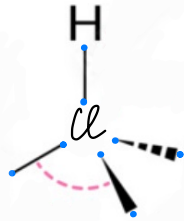
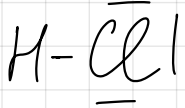
$$\alpha < \beta$$

asymmetrisch tetraedrisch gebaut

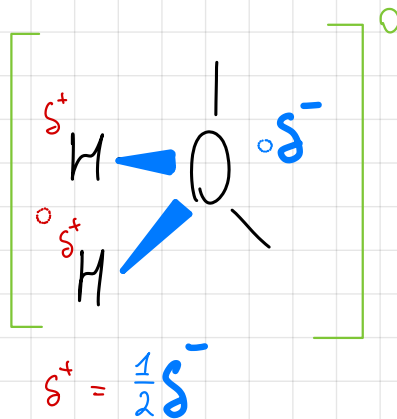


asymmetrisch tetraedrisch

$$\alpha < \beta < \gamma$$



flach
linear



$$EN(O) = 3,44$$

$$EN(H) = 2,2$$

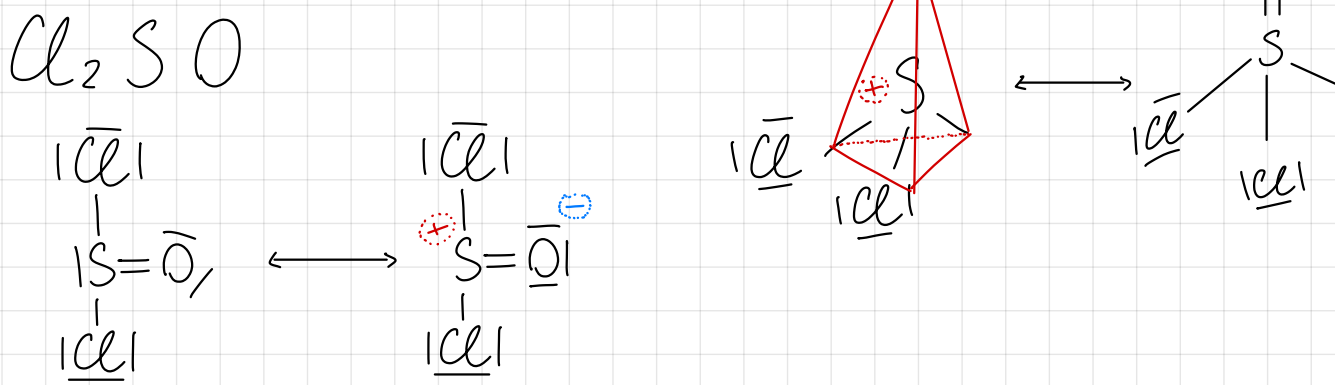
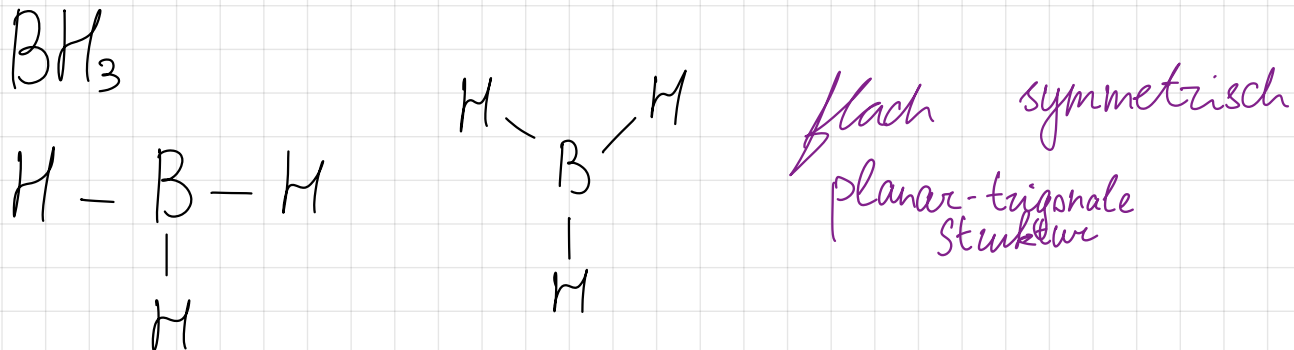
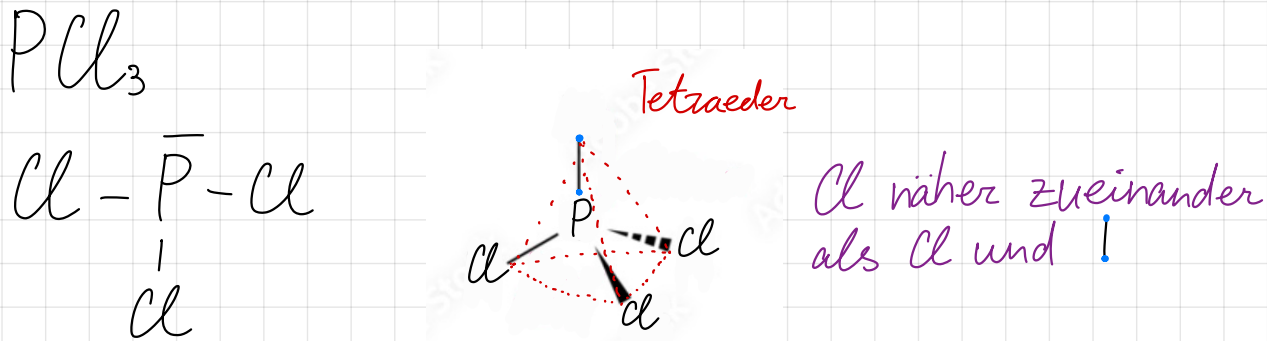
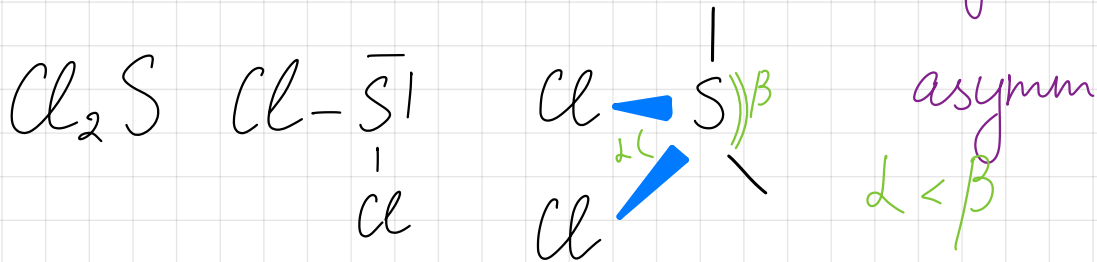
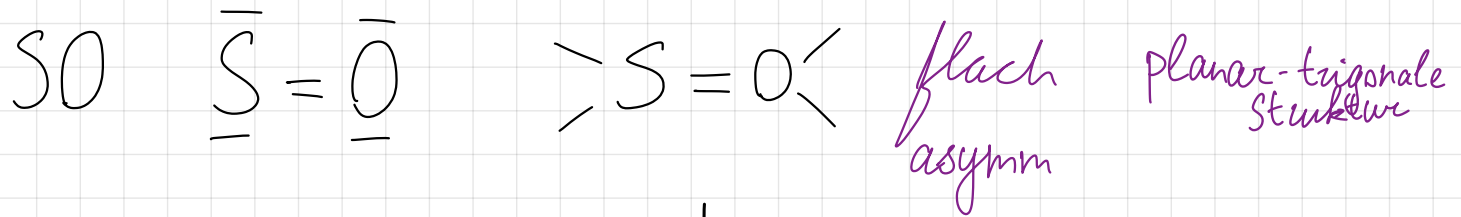
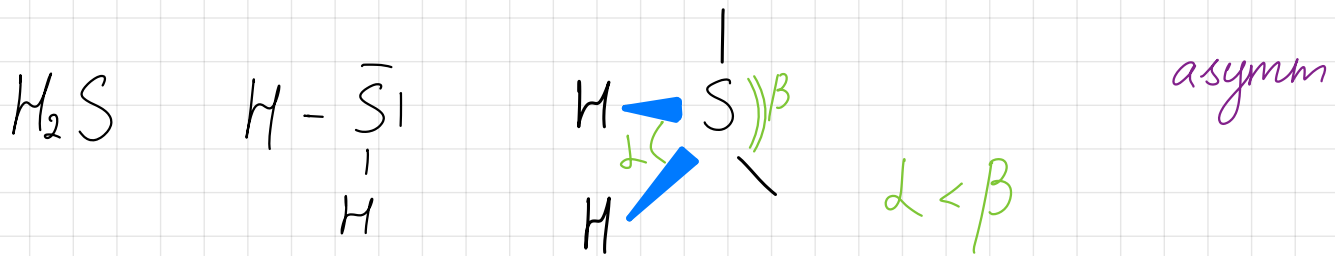
$$\Delta EN = 1,24$$

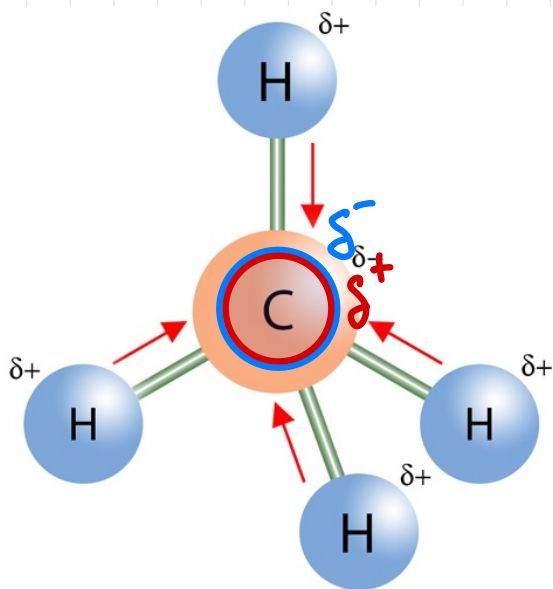
○ - Schwerpunkt der positiven Dipol-ladungen an den H-Atomen

H₂O ist ein Dipolmolekül, weil es

- eine $\Delta EN \geq 0.2$ ist
- weil es asymmetrisch gebaut ist

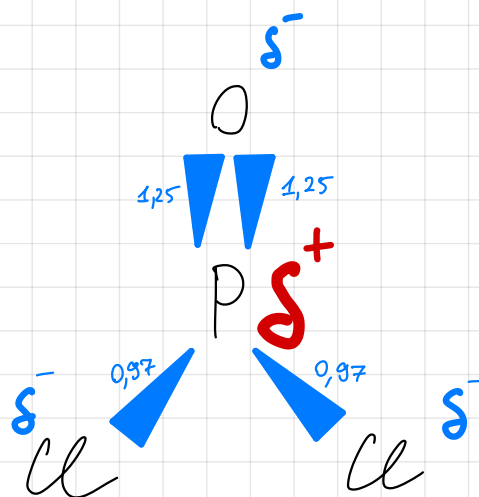
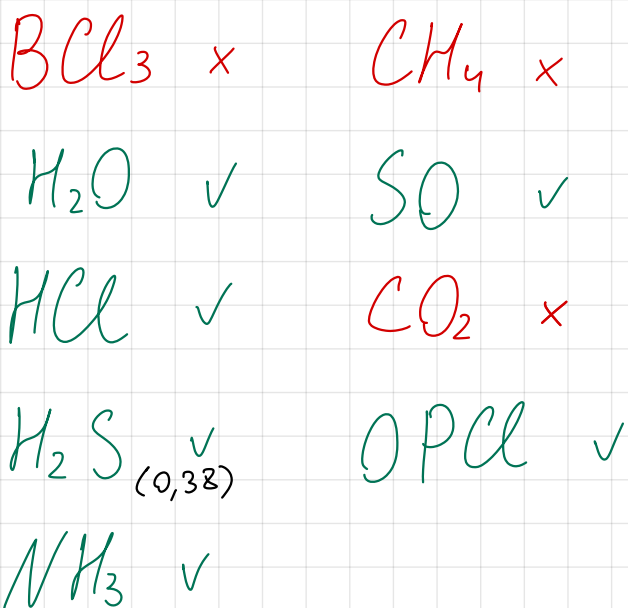
räumliche Struktur





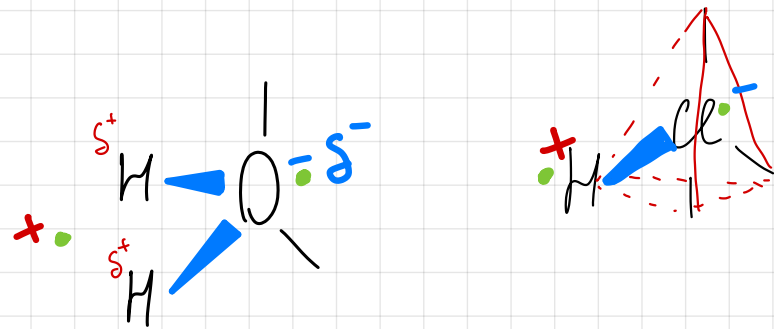
Der negative und der positive Ladungsschwerpunkt liegt an gleichen Ort, weil das Molekül **symmetrisch** gebaut ist. D.h. es kann **kein** Dipol entstehen.

Welche der folgenden Beispiele sind Dipolmoleküle?

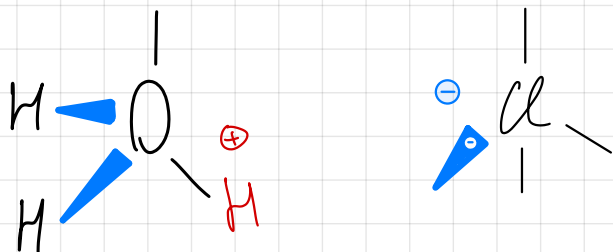
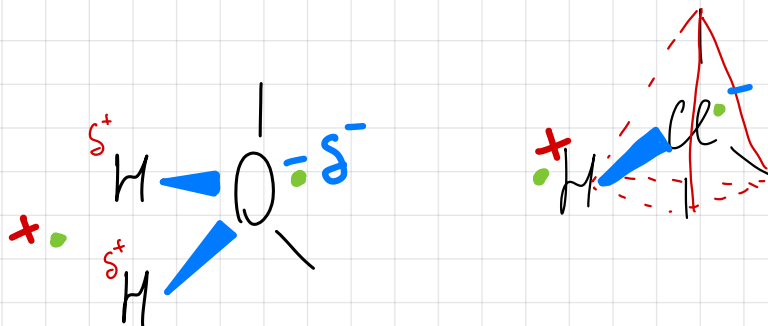


Die Reaktionen von polarisierten Molekülen:

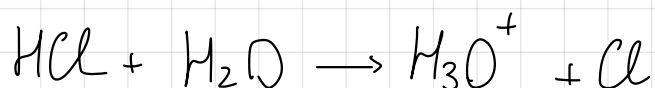
Polarisierte Moleküle können miteinander reagieren, weil sie mit ihren Dipolladungen Kräfte aufeinander ausüben können. Z.B. ist das so bei der Molekülen HCl und H₂O.



Wo gibt es zwischen beiden Molekülen die stärksten Anziehungskräfte (für die Reaktion)?



Reaktionsmechanismus



Reaktionsgleichung

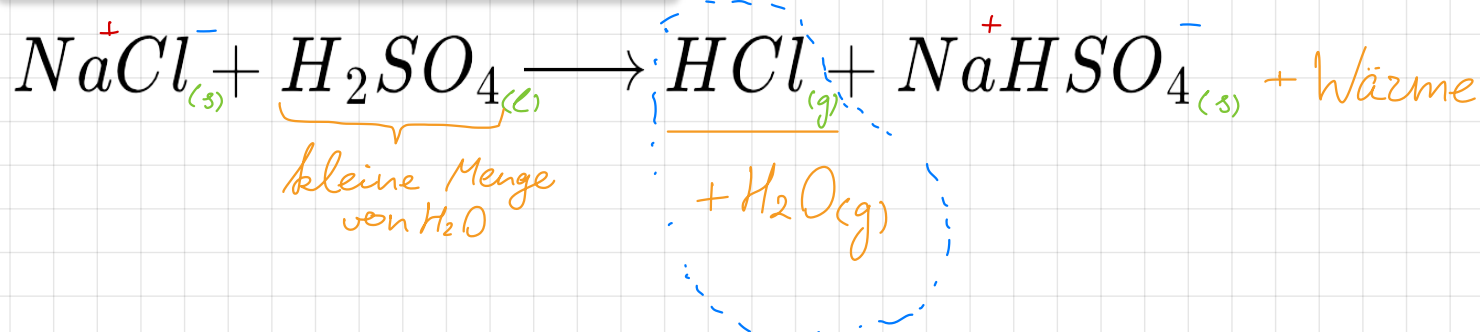
- 1) Der starke Minuspol von H_2O übt eine Abstoßungskraft auf das v. EP von HCl aus.
- 2) Gleichzeitig übt der starke Minuspol von H_2O eine Anziehungskraft auf das H-Proton von HCl aus.

--> Durch diese beiden Kräfte wird das HCl -Molekül zerstört und es entstehen zwei Produkte.

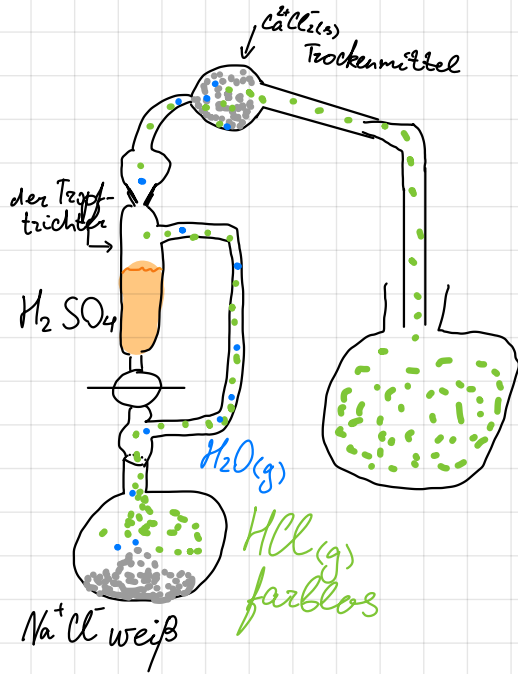
Versuch

Aufbau

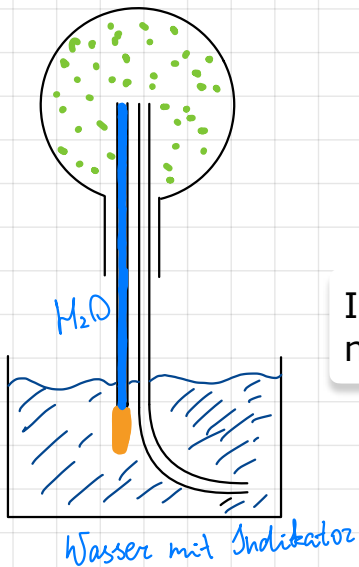
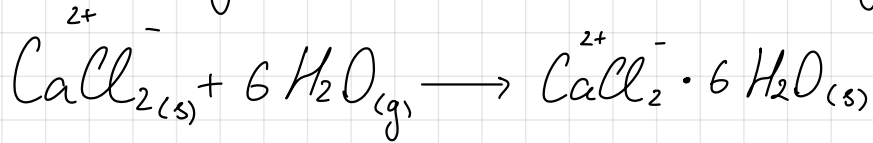
1. Teil: Herstellung von einem HCl (g)



Es entsteht ein Gemisch von den beiden Gasen, weil der Reaktion soviel Wärme frei wird. --> Man muss HCl von H_2O trennen.

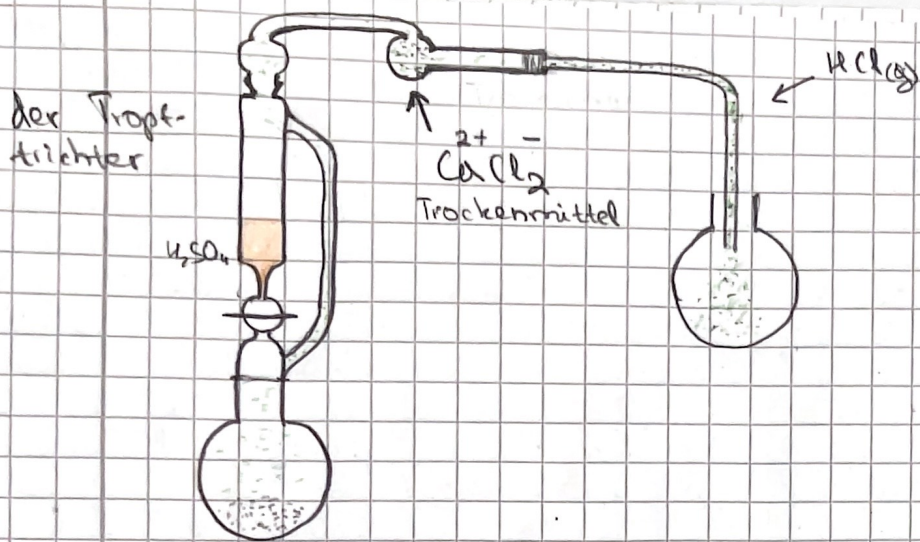


Das Gasgemisch wird vom CaCl_2 getrennt:

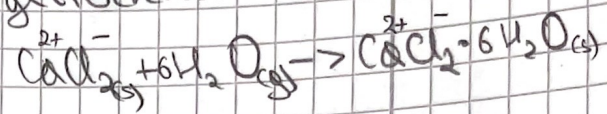


Im Wasser ist der Indikator grün gefärbt, dann zeigt er einen neutralen (nicht sauer, nicht basisch) Zustand an.

Beobachtung: Wenn man eine kleine Menge H_2O in den mit HCl -Gas gefüllten Rundkolben hineinspritzt, dann sieht man wie durch das zweite Rohr das Wasser mit dem grünen Indikator in den Rundkolben steigt und dabei seine Farbe von grün zu rot ändert, weil bei der Reaktion von HCl mit H_2O $\text{H}^+ + \text{Cl}^-$ entstehen.

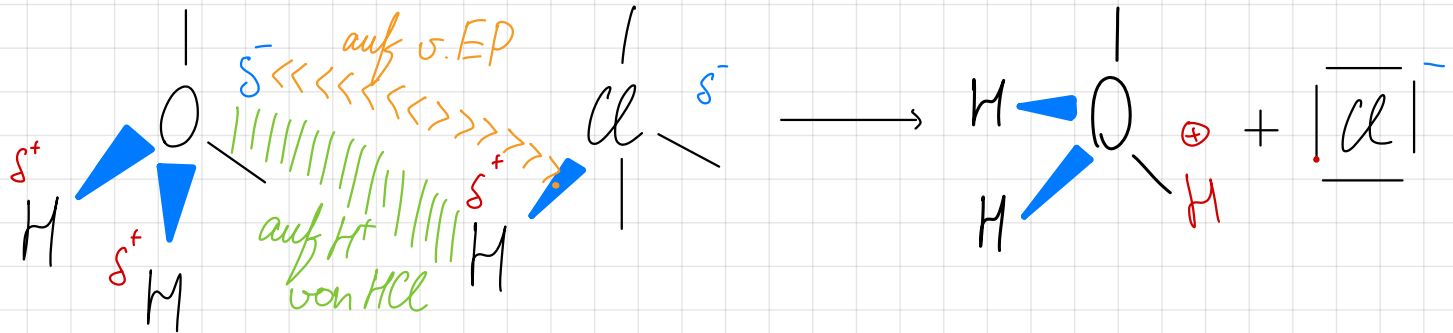


Das Gasgemisch
wird von $CaCl_2$
getrocknet:



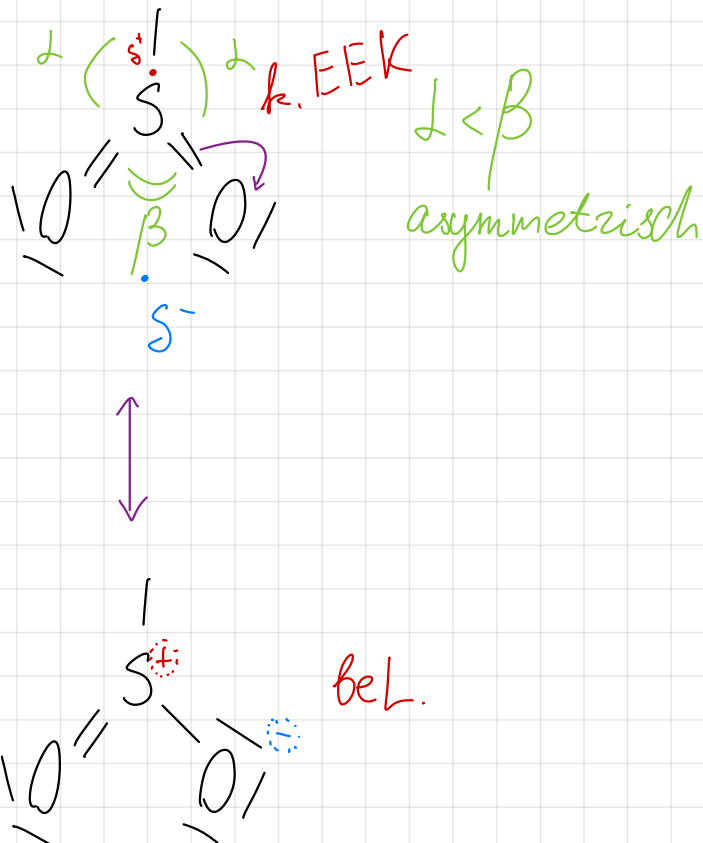
Reaktionsmechanismus

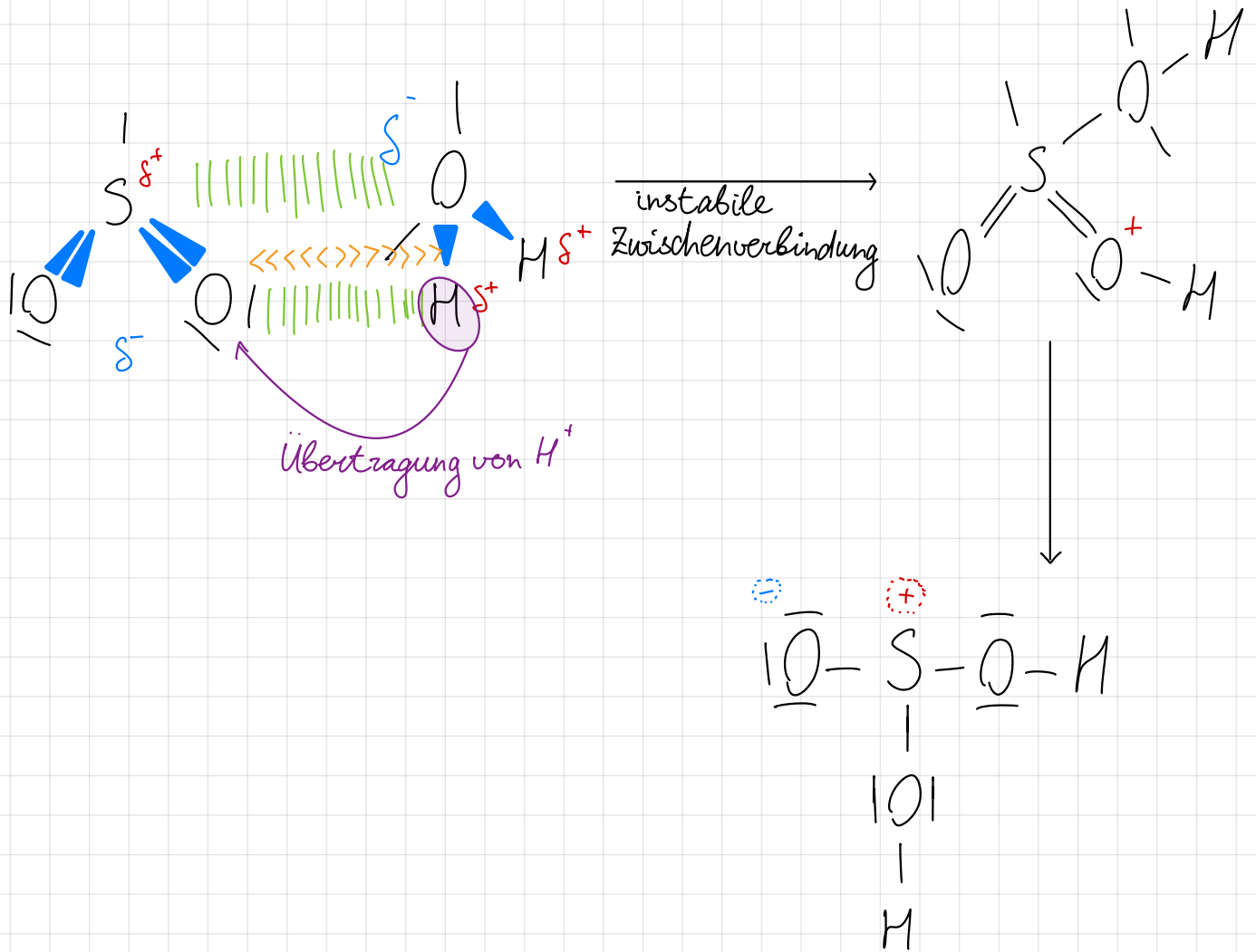
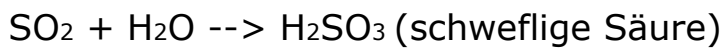
Wie die Teilchen miteinander reagieren; was bei der Reaktion geschieht.

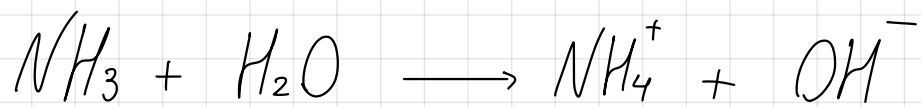


Nur der H^+ -Atomkern (Proton) wird auf H_2O übertragen.

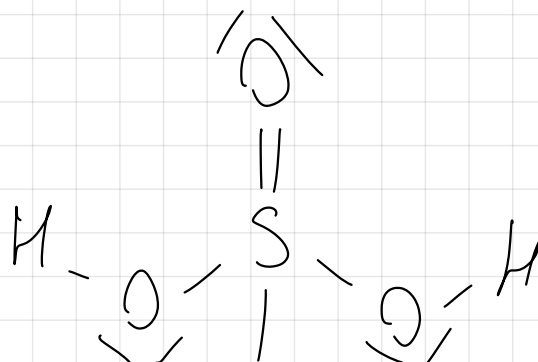
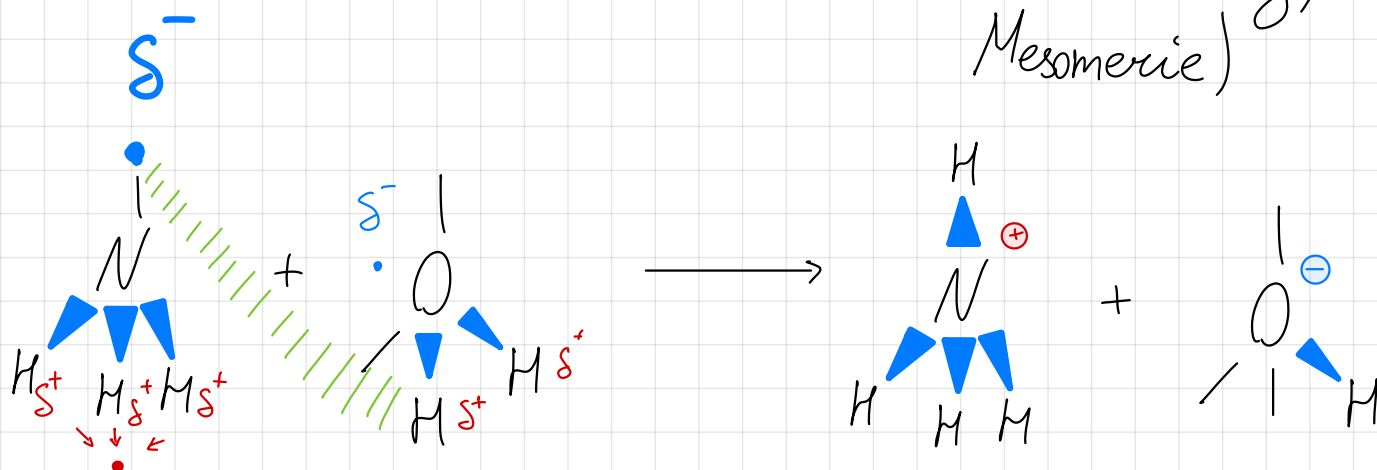
1. Schwefeldioxid SO_2

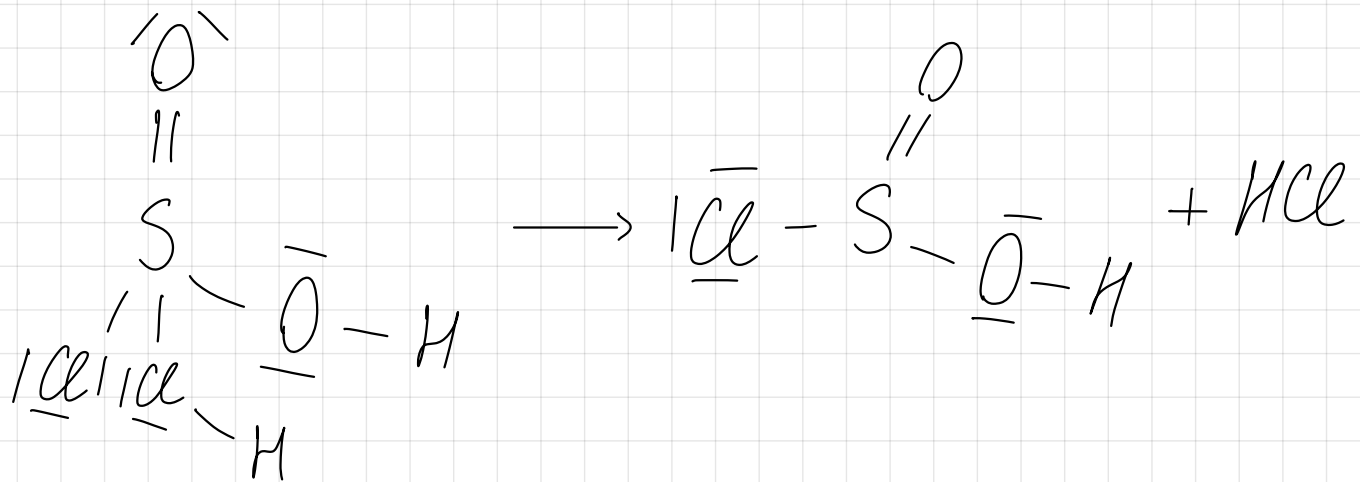
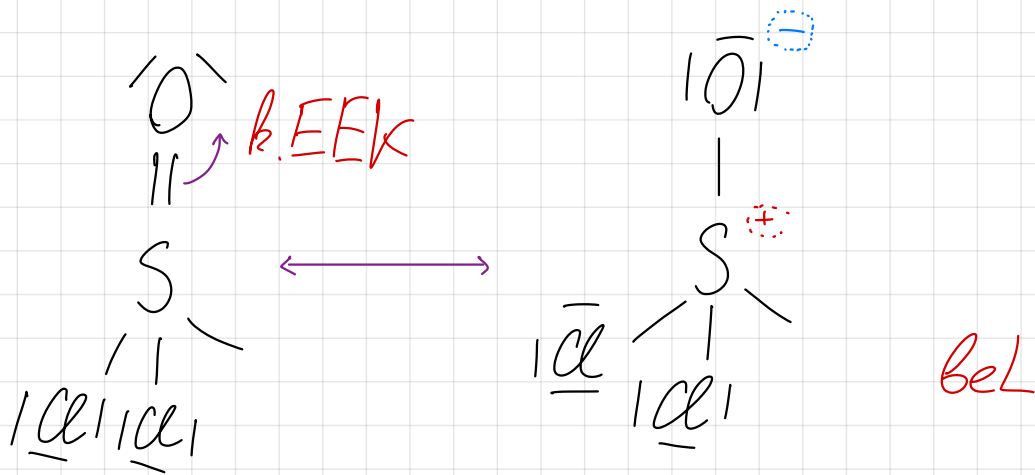
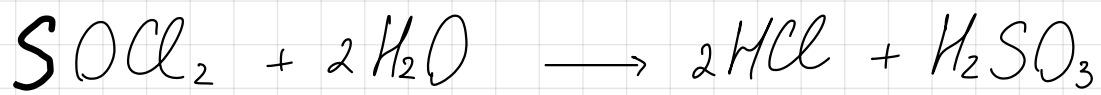


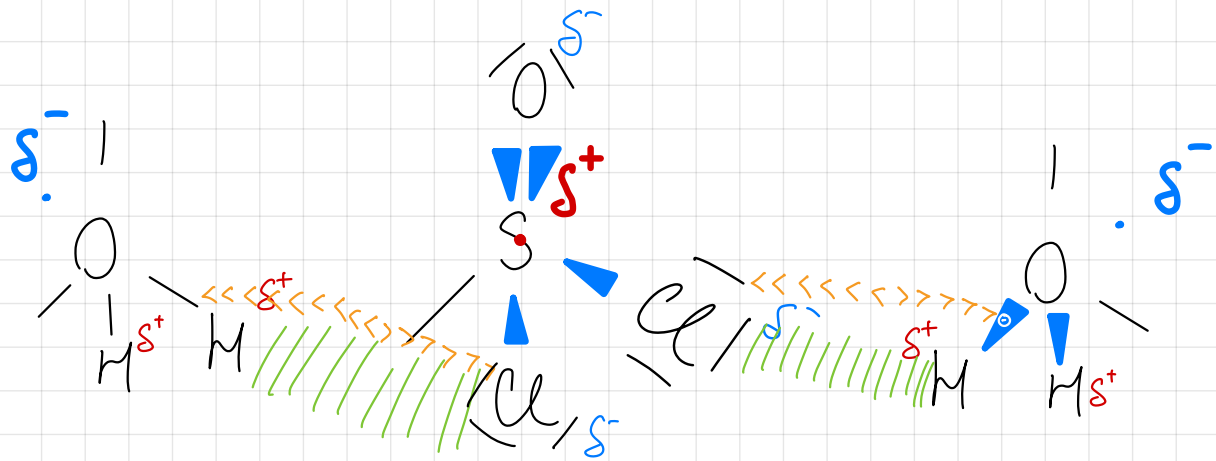




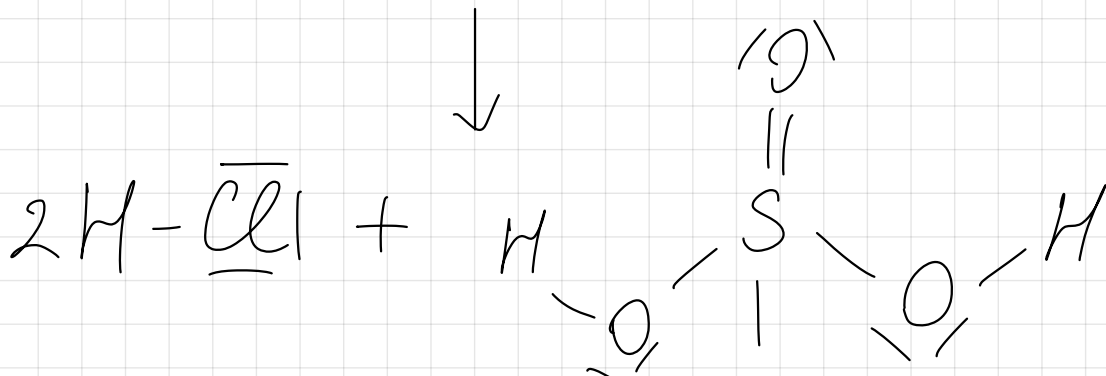
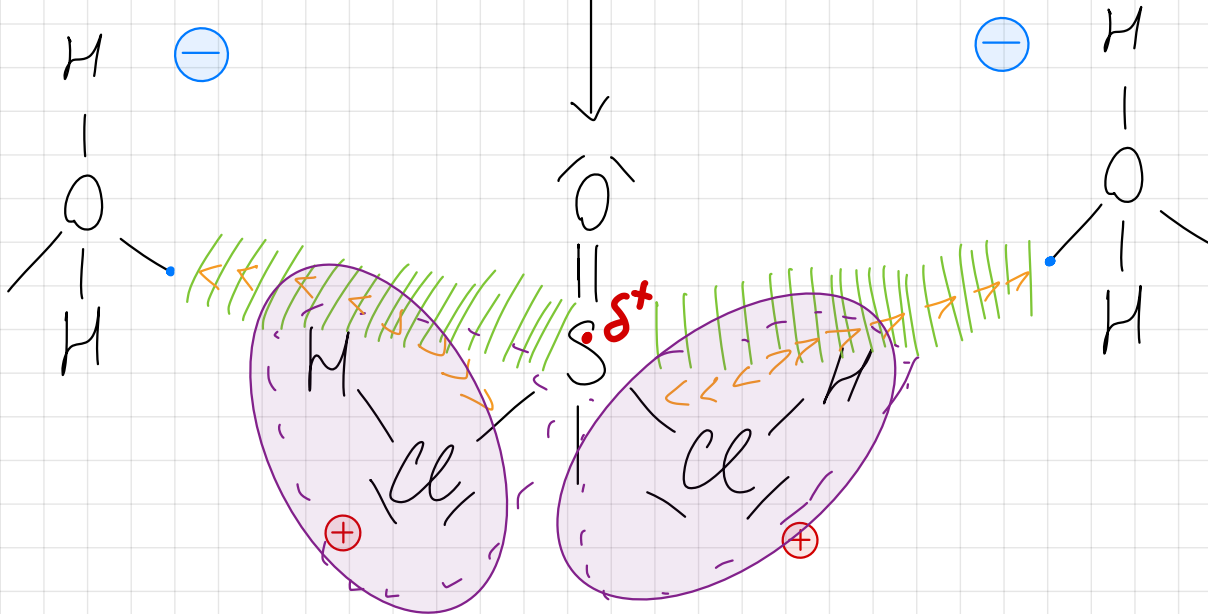
Analysieren Sie das Molekül NH_3 (3D; Symmetrie; Polarisierung; Mesomerie)



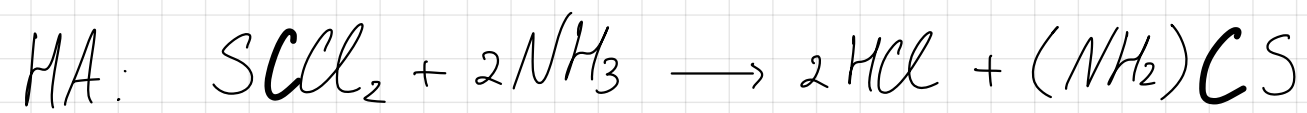




H+ wird von einem f. EP des Cl-Atoms **gebunden** / **aufgenommen**.



HCl ist ein Abgangsgruppe. Sie **löst** sich von dem Molekül **ab**.



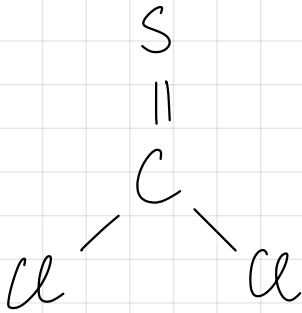
- Strukturformel --> 3D
- ΔEN --> Dipole

|
|
v

Abstoßungs-/Anziehungskräfte

|
|
v

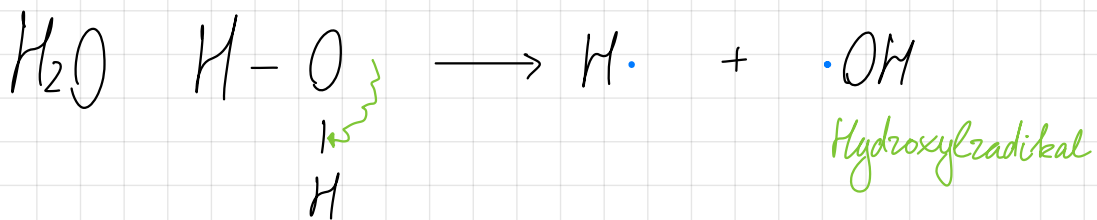
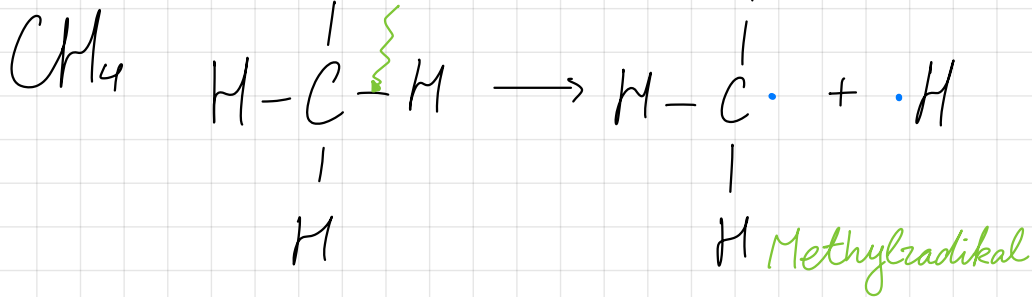
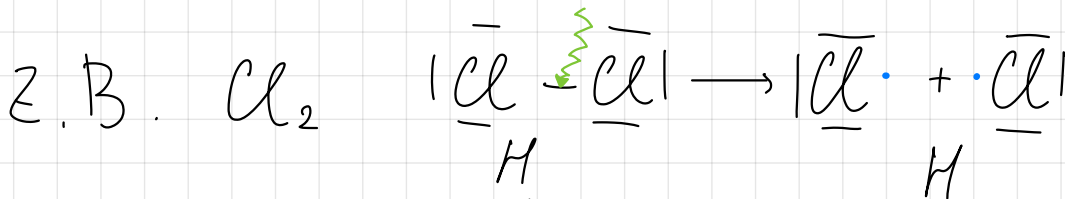
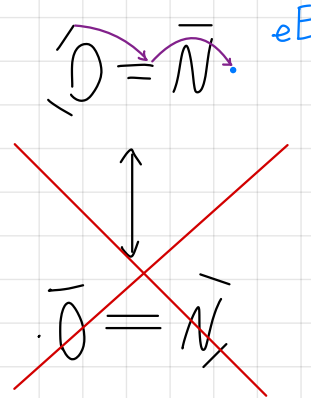
Reaktion



Auch unpolare Moleküle können reagieren. Am einfachsten ist das möglich, wenn sie mit einem Radikal reagieren, denn Radikale sind sehr instabil und besonders reaktiv, weil sie (mindestens) ein einzelnes Elektron haben (also k. EEK).

Es gibt Moleküle, die sind natürliche Radikale: NO Stickstoffmonoxid

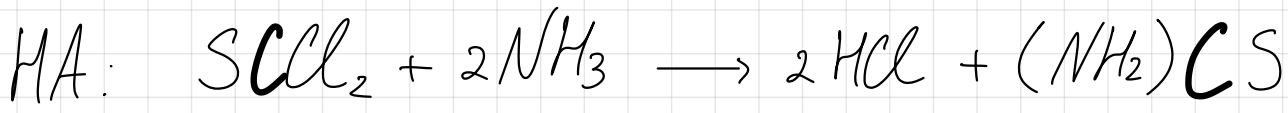
Radikale können aus "normalen" Molekülen erzeugt werden, wenn diese Lichtenergie aufnehmen und in zwei Teile geteilt werden:



Für die Spaltung eines v. EP's benötigt man bei den verschiedenen Molekülen unterschiedliche Energien (=Lichtarten).

Ein Beispiel für eine Reaktion von unpolarem Molekül ist die Reaktion von H_2 -Gas mit Cl_2 -Gas unter Zuhilfenahme von sehr energiereichem ultraviolettem Licht (UV).

1. Mit dem UV-Licht wird zunächst ein Radikal erzeugt, das dann mit den anderen Molekülen reagieren kann. (H_2 und Cl_2 reagieren von allein nicht miteinander).



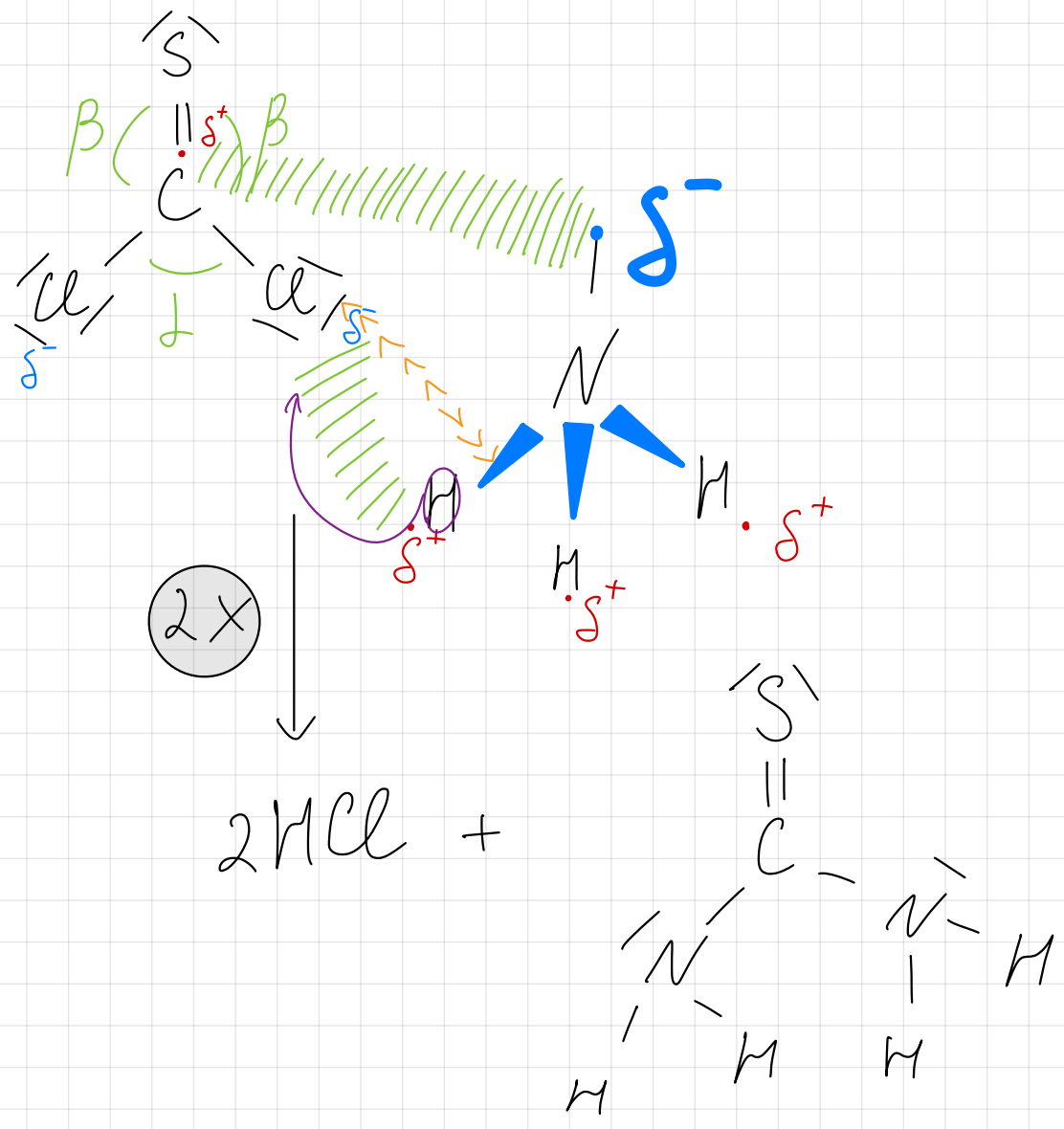
- Strukturformel --> 3D
 - ΔEN --> Dipole
- ↓
- Abstoßungs-/Anziehungskräfte
- ↓
- Reaktion

(V)EPA $\alpha < \beta$

$\Delta\text{EN}(\text{S}=\text{C}) = 0,03 \leq 0,2$

$\Delta\text{EN}(\text{C}-\text{Cl}) = 0,61$

$\Delta\text{EN}(\text{N}-\text{H}) = 0,84$

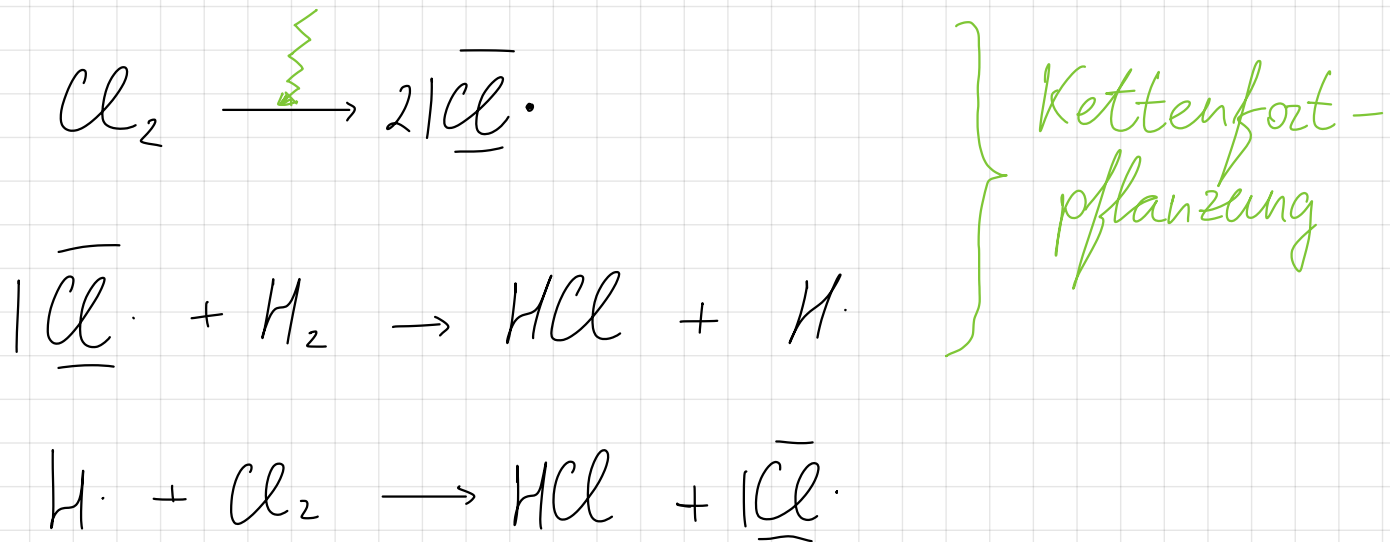


Versuch:

Gesamtreaktion: $\text{H}_2 (\text{g}) + \text{Cl}_2 (\text{g}) \rightarrow 2\text{HCl} (\text{g})$

Beobachtung: Die Reaktion verläuft explosiv. Man hört einen Knall; Stopfen und Reagenzglas bewegen sich in entgegengesetzte Richtungen; die Stoffe geben Lichtenergie ab.

Interpretation: Die Reaktion startet mit der Spaltung von einigen Cl_2 -Molekülen, das nennt man Kettenstart(-reaktion):



Die Kettenfortpflanzung hört erst dann auf, wenn mindestens eines der Edukte vollständig verbraucht ist.

Für eine Kettenfortpflanzung kann man ein allgemeines Reaktionsschema angeben.

$\text{R1} + \text{Edukt} \rightarrow \text{Produkt} + \text{R2}$

$\text{R2} + \text{Edukt} \rightarrow \text{Produkt} + \text{R1}$

Edukte und Produkte können unterschiedlich sein

In dem reagierenden Stoffsystem finden gleichzeitig auch noch Nebenreaktionen statt. Welche das sind, ist abhängig von den Teilchen, die im Stoffsystem zufällig aufeinander treffen:

$\text{Cl} + \text{H} \rightarrow \text{HCl}$

$\text{Cl} + \text{Cl} \rightarrow \text{Cl}_2$

$\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2$

Keine neuen Radikale $\rightarrow$ Kettenabbruchreaktionen

2. Beispiel: Die Kettenreaktion von NO mit O₃.

NO_• ist ein natürliches Radikal. Für dieses Stoffsystem benötigt man keine Kettenfortreaktion.

Kettenfortpflanzung: NO_• + O₃ → O₂ + NO₂.

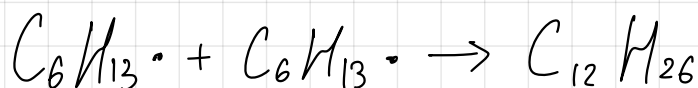
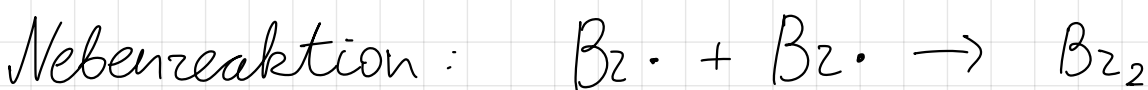
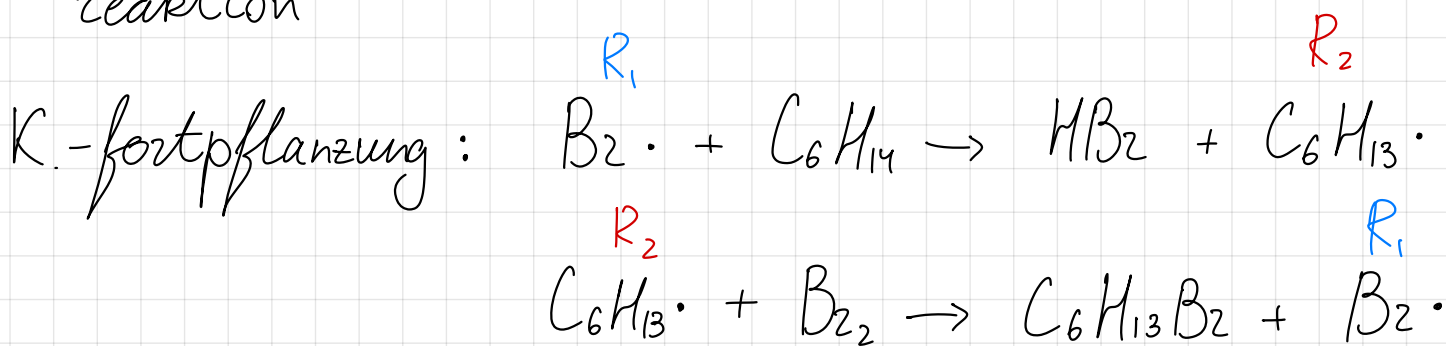
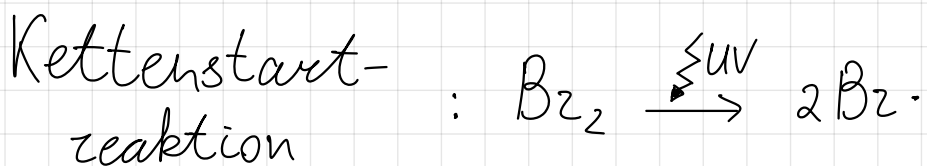
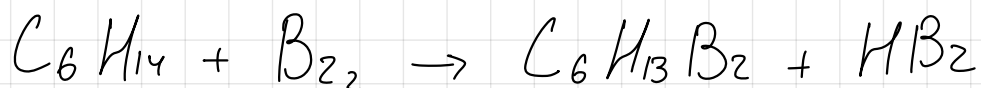
HA: Finden Sie den 2. Teil der Kettenreaktion, die Gesamtreaktionsgleichung und die Kettenabbruchreaktionen.

Versuch: Die Reaktion von Brom mit Hexan (C_6H_{14})

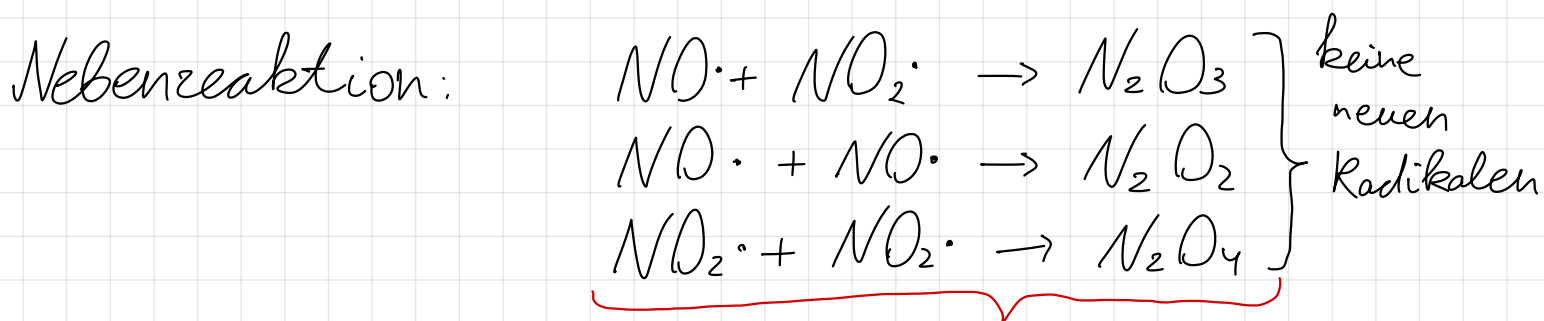
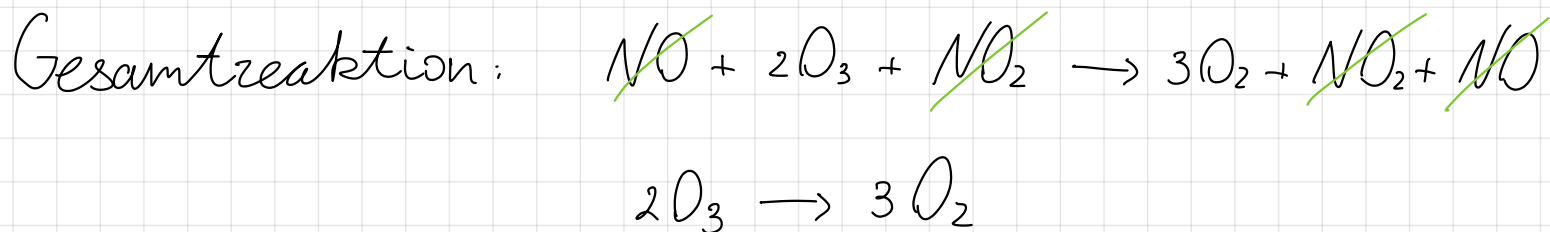
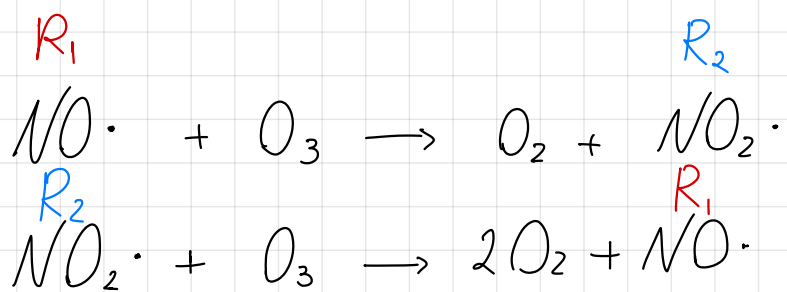
Ein Gemisch von Hexan und Brom wird auf zwei Reagenzgläser verteilt. Eines daran wird mit Alufolie umhüllt. Beide werden in das Sonnenlicht gestellt.

Beobachtung: Nach ca. 15 Minuten hat sich nur in dem Reagenzglas ohne die Alufolie die Farbe von rot-braun (Brom) zu farblos, trüb geändert.

Interpretation des Versuchs:

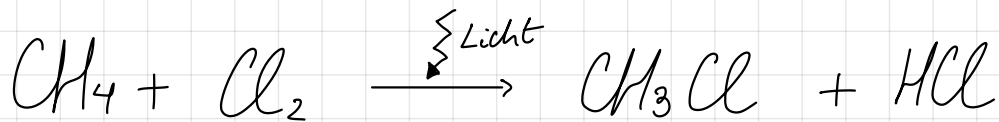


Beim Produkt des Versuchs kann man nach ca. 1 Stunde beobachten, dass die Trübung als festes Material auf den Boden des Reagenzglases sinkt

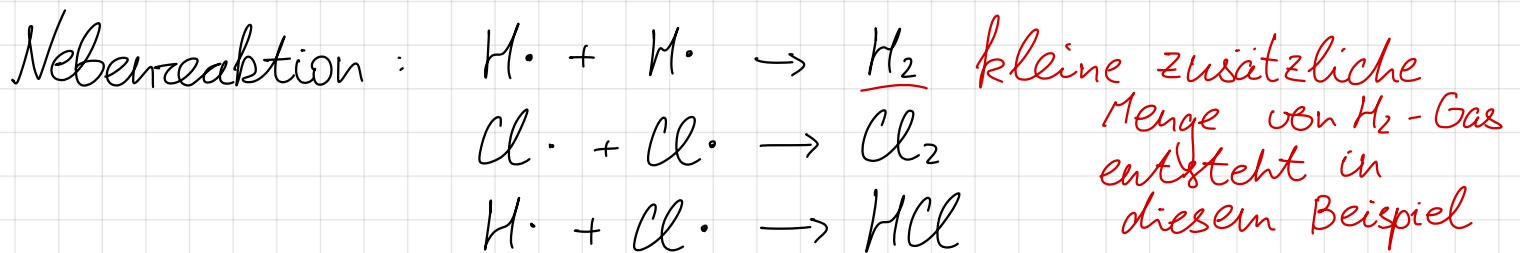
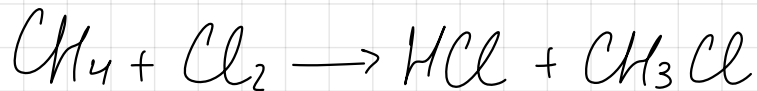
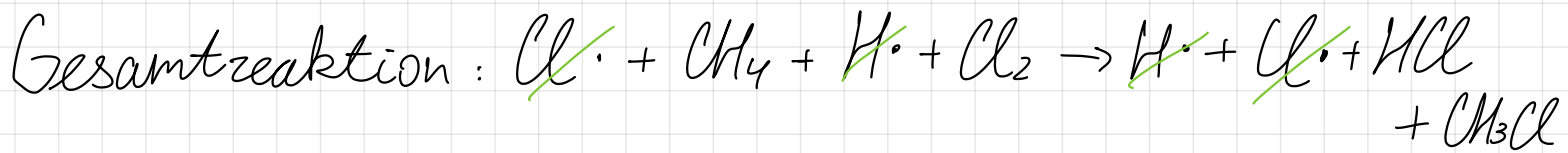
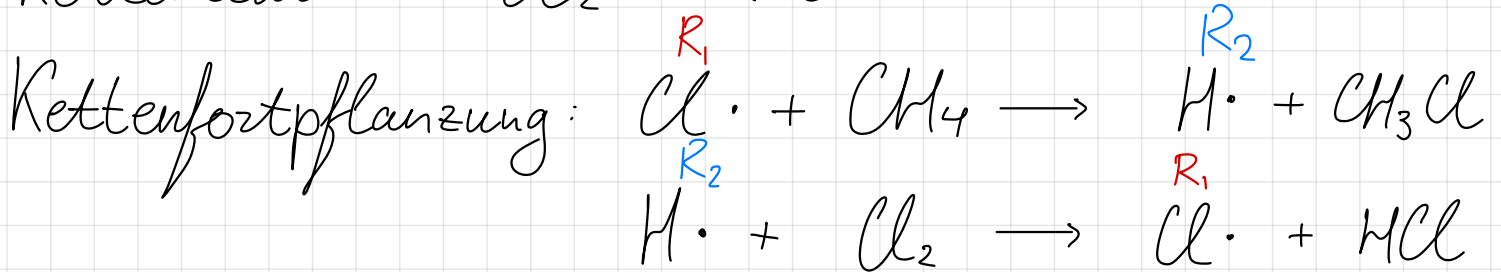
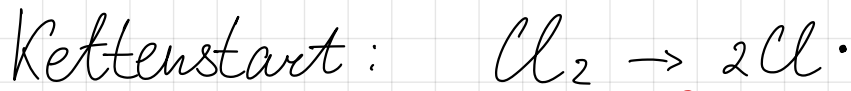


Kettenabbruchreaktion

Übung: Die Kettenreaktion von Chlor mit Methan (CH₄)

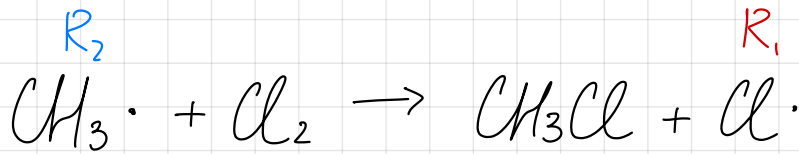


I

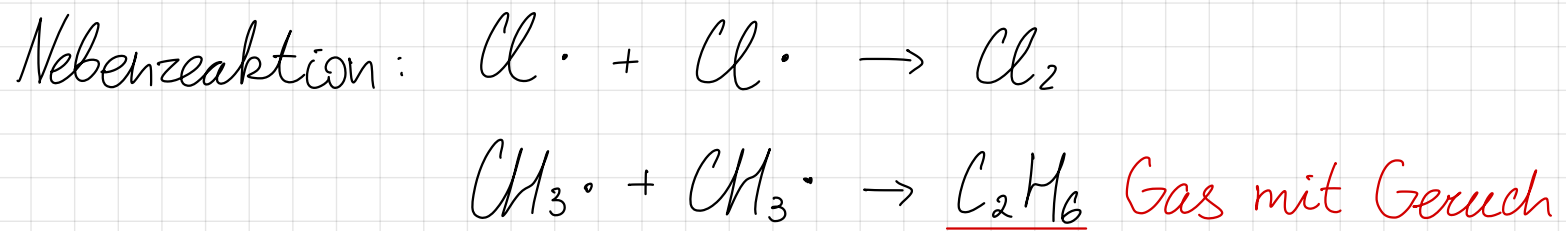


(falsch)

Reaktionsmechanismus II



Für dieses Stoffsystem gibt es zwei Möglichkeiten für einen Reaktionsmechanismus, der zur selben Gesamtreaktion führen kann. Wie kann man entscheiden, welcher Reaktionsmechanismus der richtige ist?



Durch Untersuchung der Eigenschaften der Nebenprodukte des Versuchs kann man unterscheiden, welcher Reaktionsmechanismus der richtige ist. (Hier findet man, dass das Nebenprodukt C_2H_6 entsteht).

Metallische Stoffe:

- Metalle (Elemente)
- metallische Verbindungen (Legierung)

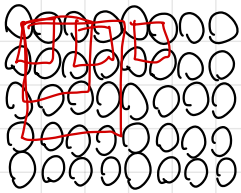
Metallische Stoffe sind kristalline Stoffe. (der Kristall)

Wenn sich Atome (Teilchen) in geometrischen Formen anordnen, dann entstehen Kristalle

Das Modell für solche Atome sind kugelförmige Teilchen. Wenn sie ohne Ordnung übereinander liegen, bilden sie einen Haufen, der keine Struktur hat. Das nennt man ein amorpher Körper.

Wenn die Atome (=Teilchen) eine geometrische Ordnung haben, dann entsteht eine Struktur und ein kristalliner Körper.

Die einfachste Möglichkeit dafür ist eine quadratische Anordnung der Teilchen:



quadratischer Kugelschicht

Eine andere Möglichkeit ist eine hexagonale Anordnung der Kugeln

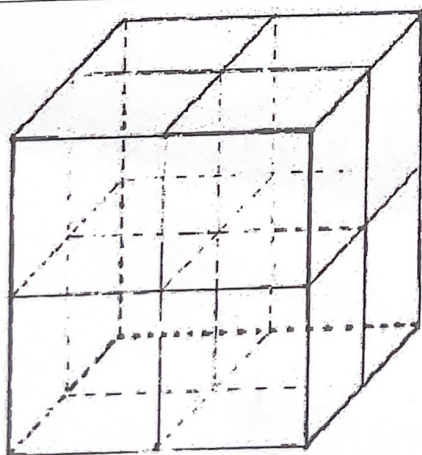
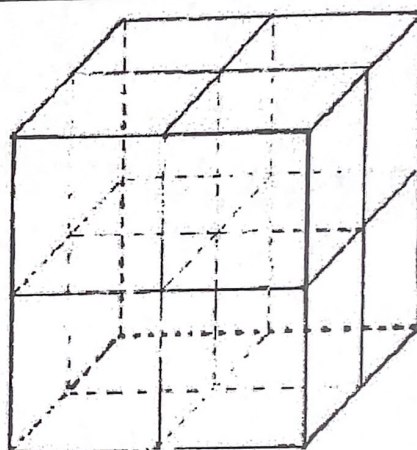
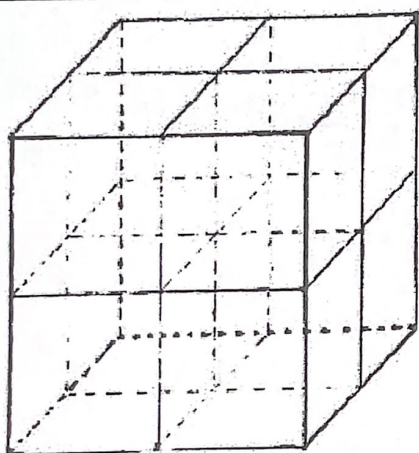
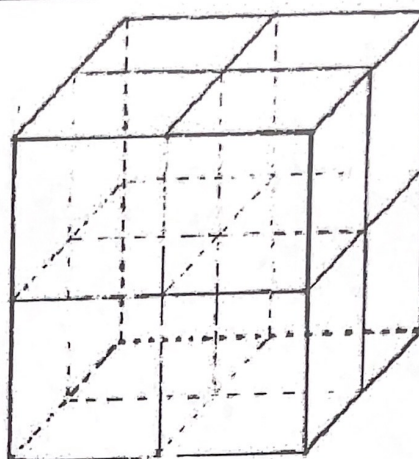
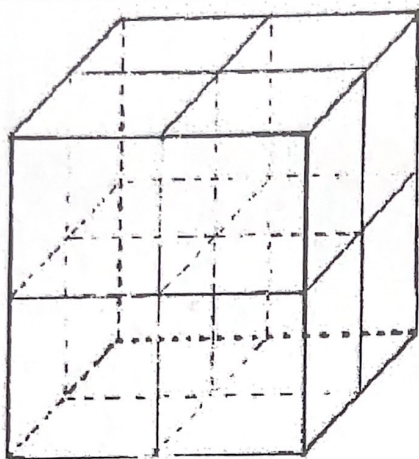


Zwischen den Kugeln (im Modell) bzw. den Teilchen (im kristallinen Stoff) gibt es leere Plätze. Sie heißen **Lücken**. Lücken in einer quadratischen Schicht sind größer, als in einer hexagonalen Schicht. --> D.h. quadratische Schichten haben eine schlechtere Flächenausnutzung, als hexagonale Schichten.

In einem Stoff gibt es viele übereinander angeordnete Kugelschichten: **Schichtfolge**.

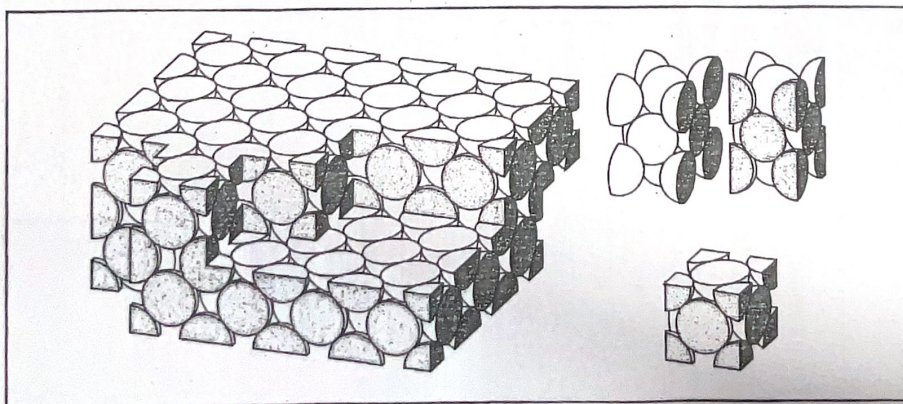
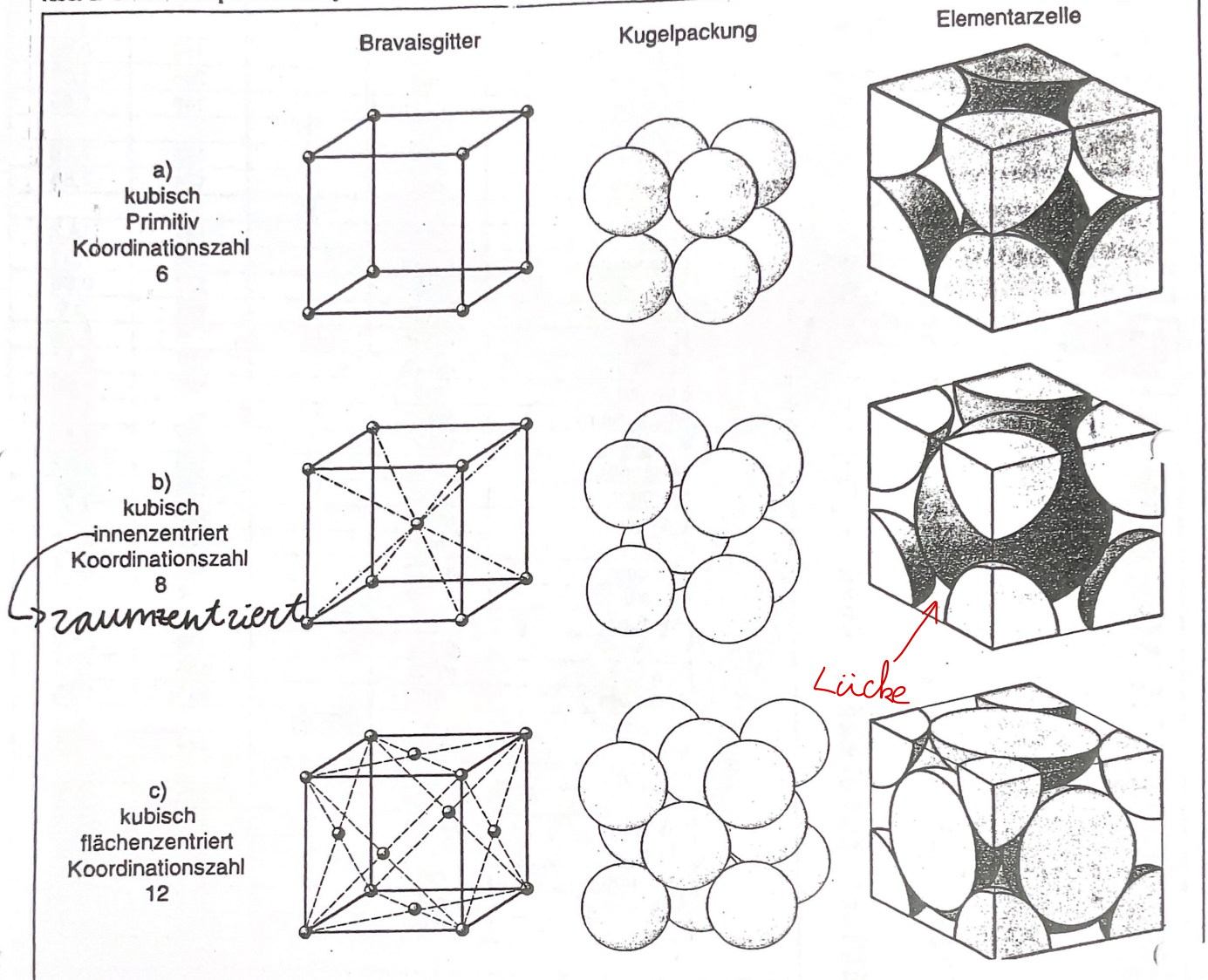
Bei quadratischen Schichtfolgen gibt es zwei Möglichkeiten:

1. Die Kugeln von Schicht A liegen **genau** unter den Kugeln von Schicht B. Diese Anordnung ist mechanisch **nicht stabil**, denn schon durch klein Erschütterungen rutschen die Kugeln des Modells über die Lücken der darunter liegenden Schicht. Diese Anordnung nennt man kubisch-primitiv: Bei den Metallen gibt es sie nicht, aber bei Ionenverbindungen.
2. ... Kugeln von B über Lücken von A. Diese Anordnung ist stabil. Man findet sie in Metallen wie z.B.: Fe, Na, K, Cr, ...



Verschiedene Modelle der kubischen EZ

Abb. 1: Elementarkörper kubischer Symmetrie in verschiedener Darstellung



Das Modell zeigt nicht die vollständigen Kugelschichten, sondern den kleinsten räumlichen Teil des Modells von der Schichtfolge A,B; A,B; A,B... den man zeichnen kann.

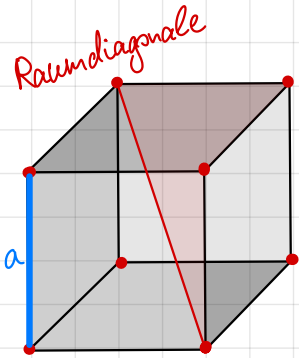
Wenn man mit diesen kleinsten Ausschnitten der Schichtfolgen AB den gesamten Kristall erzeugen will, muss man sie wiederholen (=nebeneinander stellen)

Problem: An der Stelle **X** im mittleren Würfel fehlte ein raumzentriertes Teilchen.

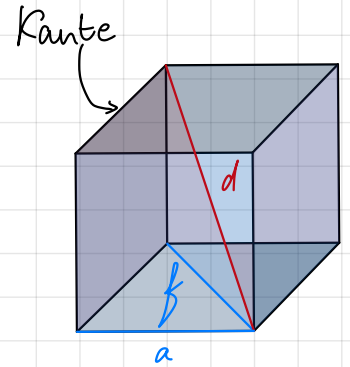
--> Wenn man aus den Ausschnitten ein Modell für den ganzen Kristall erzeugen will, dann muss man diesen Ausschnitt aus den Kugelschichten ausschneiden. --

> D.h. die Kugeln an den Ecken sind nicht vollständig.

Theoretische Berechnung der Dichte eines Metalls mit kubisch innenzentrierte Struktur



Die krw. EZ. wird von 9 Teilchen gebildet. Das rz. Teilchen befindet sich vollständig in der EZ. Die Acht Teilchen an den Ecken befinden sich zu je einem Achtel **in** der EZ. Sie berühren sich nur auf der Raumdiagonalen, nicht auf den Kanten.



$$\rho(x) := \frac{m(x)}{V(x)}$$

Der Stoff x ist aus vielen Elementarzellen (EZ'n) aufgebaut, die genau diese Eigenschaft haben; denn die EZ ist das kleinste Stück von diesen Stoff, das es gibt.

Wie groß ist die Masse eines Atoms von Natrium (Na)?
Wie viele Na-Atome gibt es in einer EZ?

$$M(\text{Na}) = 22,99 \text{ g/mol}$$

$$N_{EZ}(\text{Na}) = 1 + \frac{8}{8} = 2$$

$$m_{\text{Atom}}(\text{Na}) = \frac{22,99 \text{ g/mol}}{6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}} = 3,818 \cdot 10^{-23} \text{ g}$$

$$m_{EZ}(\text{Na}) = N_{EZ}(\text{Na}) \cdot m_{\text{Atom}}(\text{Na}) = 7,635 \cdot 10^{-23} \text{ g}$$

$$V_{EZ}(\text{Na}) = ? \quad r_{\text{Atom}}(\text{Na}) = 186 \text{ pm} \quad d = 4R = a \cdot \sqrt{3}$$

$$V_{EZ}(\text{Na}) = \left(\frac{4}{\sqrt{3}} \cdot 186 \cdot 10^{-12} \right)^3 = 7,926 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

Wirklichkeit : $0,97 \text{ g/cm}^3$

$$\rho(\text{Na}) = \frac{m_{EZ}(\text{Na})}{V_{EZ}(\text{Na})} = \frac{7,635 \cdot 10^{-23} \text{ g}}{7,926 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3} \cdot (100)^{-3} = 0,9633 \text{ g/cm}^3$$

$\text{m}^3 \rightarrow \text{cm}^3$

$$a^2 + a^2 = f^2$$

$$a^2 + f^2 = d^2$$

$$3a^2 = d^2$$

$$d = \sqrt{3}a = 4R$$

$$a = \frac{4}{\sqrt{3}}R \quad V = \left(\frac{4}{\sqrt{3}}R\right)^3$$

Um zu beurteilen, wie gut der theoretisch berechnete Wert (d.h. das Modell) ist, berechnet man die prozentuale Abweichung:

$$p_{\%} = \frac{\rho_{\text{EZ}} - \rho}{\rho} \cdot 100\% = -0,68\%$$

Zum Vergleich: Die Dichte eines Natriumatoms

$$\rho_{\text{Atom}}(\text{Na}) = \frac{m_{\text{Atom}}(\text{Na})}{V_{\text{Atom}}(\text{Na})} = \frac{M(\text{Na}) : N_A}{\frac{4}{3}\pi \cdot R^3} = 1,416 \text{ g/cm}^3$$

Fe ist ein Element mit einer krz. Struktur.

Die molare Masse ist $M(\text{Fe}) = 55.845 \text{ g/mol}$

Der Radius eines Fe-Atoms ist $R(\text{Fe}) = 124 \text{ pm}$

$$\rho(\text{Fe}) = 7,86 \text{ g/cm}^3$$

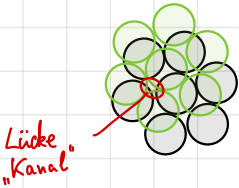
$$= \frac{2 \cdot 55,845 \text{ g/mol}}{6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}} \cdot \left(\frac{4}{\sqrt{3}} \cdot (124 \cdot 10^{-12}) \text{ m}\right)^3} = 7,898 \text{ g/cm}^3$$

+0.483%

Wenn Schichten mit hexagonaler Geometrie übereinander gestapelt werden, dann entstehen Strukturen, die andere EZ besitzen.

Bei hexagonalen Schichten kann man drei Schichtfolgen unterscheiden.

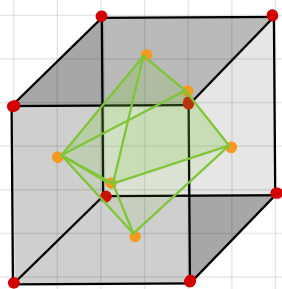
1. **Schichtfolge A, A, A, ...** die Kugeln / Teilchen liegen genau übereinander. Das ist mechanisch sehr instabil; In der Realität bei Metallen kommt **selten** vor.
2. **Schichtfolge AB, AB, AB, ...** die Kugeln von B liegen über einigen Lücken von Schicht A.



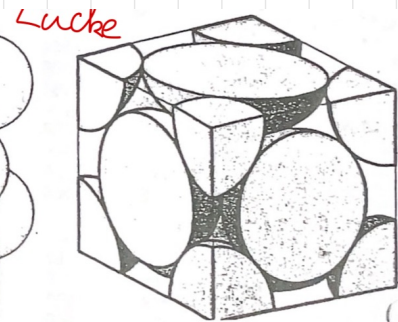
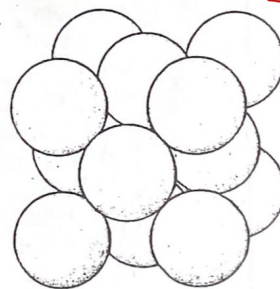
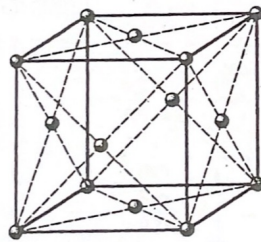
3. Die Schichtfolge ABC, ABC, ABC, ... die Kugeln von Schicht C liegen über den offenen Lücken von den Schichten AB. Dadurch sind alle Lücken bedeckt. In dem Material gibt es dann keine "Kanäle".

--> Im Folgenden wird nur noch über die Schichtfolge ABC gesprochen: Welche Struktur hat eine EZ von einem Metall, das aus hexagonalen Schichtfolgen ABC gebaut ist?

Die EZ ist kubisch-flächenzentriert und besteht aus insgesamt 14 Atomen, die sich aber nur teilweise in der EZ befinden



kfz.
c)
kubisch
flächenzentriert
Koordinationszahl
12



14 Teilchen bilden die kfz. EZ. **In** der EZ sind aber nur: $N_{EZ} = 8 * (1/8) + 6 * (1/2) = 4$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

$$\rho(Au) = \frac{m_{EZ}(Au)}{V_{EZ}(Au)} = \frac{Z_{EZ}(Au) \cdot M_{EZ}(Au)}{\left(\frac{4}{\sqrt{2}} R\right)^3} = \frac{N_{EZ}(Au) \cdot M_{EZ}(Au)}{N_a \cdot \left(\frac{4}{\sqrt{2}} R\right)^3} =$$

$$= \frac{4 \cdot 196,97 \text{ g/mol}}{6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}} \cdot \left(\frac{4}{\sqrt{2}} \cdot 144 \cdot 10^{-12} \text{ m}\right)^3} = 19,364 \text{ g/cm}^3$$

+0,33%

$$\rho(Au) = 19,3 \text{ g/cm}^3$$

$$R(Cu) = 127,5 \text{ pm}$$

$$M(Cu) = 63,546 \text{ g/mol}$$

$$\rho(Cu) = 8,96 \text{ g/cm}^3$$

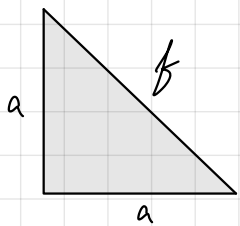
8,999...

Metallische Verbindungen: Legierungen

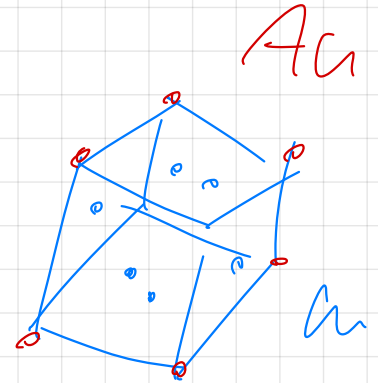
Bei einem reinem Metall befinden sich die Atome auf den so genannten "Gitterplätzen" der EZ. Bei einer kubischen EZ sind das 1. die acht (8) Ecken und entweder das Raumzentrum oder sechs (6) Flächenmitten.

Bei einer Legierung werden diese verschiedenen Gitterplätze von Atomen unterschiedlicher Elementen besetzt.

Berechnen Sie die Dichte der gezeigten Au-Cu-Legierung, berücksichtigen Sie dabei, dass $f = 2(R(\text{Au}) + R(\text{Cu}))$ ist.



$$\begin{aligned} a^2 + a^2 &= f^2 \\ a^2 &= \frac{f^2}{2} \\ a &= \frac{f}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

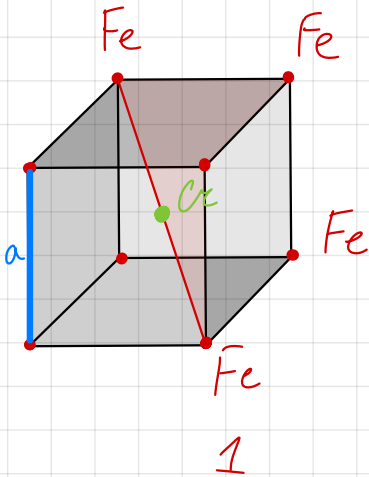


$$\begin{aligned} \rho(L) &= \frac{m(L)}{V(L)} = \frac{m(\text{Cu}) + m(\text{Au})}{\left(\frac{2R(\text{Cu}) + 2R(\text{Au})}{\sqrt{2}} \right)^3} = \\ &= \frac{2(\text{Cu}) \cdot M(\text{Cu}) + 2(\text{Au}) \cdot M(\text{Cu})}{\left(\frac{2R(\text{Cu}) + 2R(\text{Au})}{\sqrt{2}} \right)^3} = \\ &= \frac{\frac{N(\text{Cu})}{N_A} \cdot M(\text{Cu}) + \frac{N(\text{Au})}{N_A} \cdot M(\text{Cu})}{\left(\frac{2R(\text{Cu}) + 2R(\text{Au})}{\sqrt{2}} \right)^3} = \\ &= \frac{\overset{3}{N(\text{Cu})} \cdot M(\text{Cu}) + \overset{1}{N(\text{Au})} \cdot M(\text{Cu})}{N_A \cdot \left(\frac{2R(\text{Cu}) + 2R(\text{Au})}{\sqrt{2}} \right)^3} = 11,37 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \end{aligned}$$

KFZ

$$R(\text{Fe}) = 124\text{pm}$$

$$R(\text{Cr}) = 124\text{pm}$$



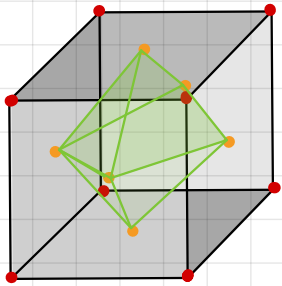
KRZ

$$\rho_{\text{EZ}}^{(x)} = \frac{N(\text{Fe}) \cdot M(\text{Fe}) + N(\text{Cr}) \cdot M(\text{Cr})}{N_A \cdot \left(\frac{2R(\text{Fe}) + 2R(\text{Cr})}{\sqrt{3}} \right)^3} = 7,626 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

Bei Legierungen aus Metallen mit gleicher EZ befinden sich die Atome auf den Gitterplätzen.

Raumausnutzung in einer kfz. EZ.

$$\eta_{\%} = \frac{V_{Teilchen}}{V_{EZ}} \cdot 100\%$$



$$V_{Teilchen} = 4 \cdot V_{Kugel} = 4 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3$$

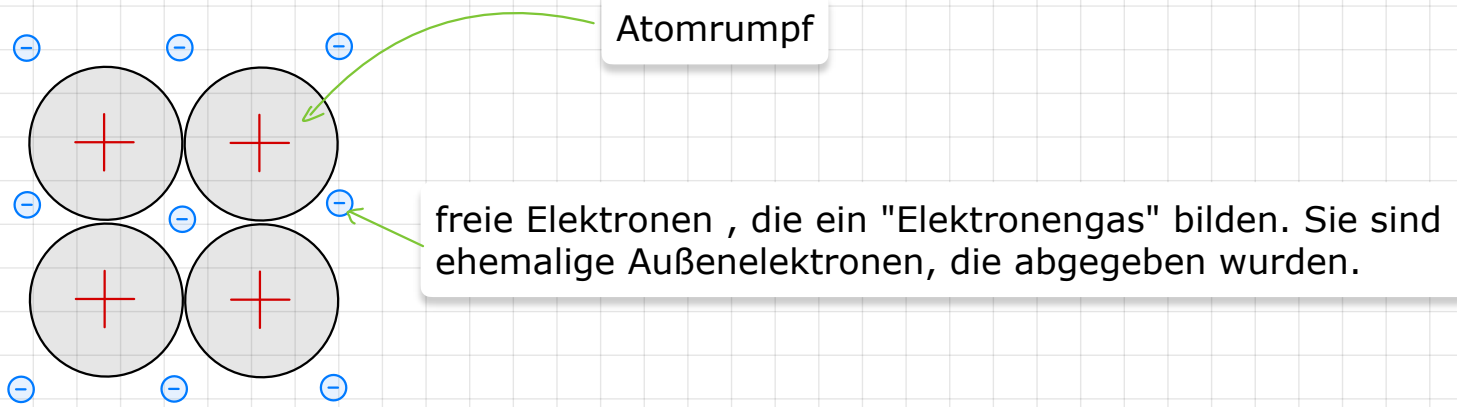
$$\eta_{\%} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi}{(2\sqrt{2})^3} \cdot \frac{R^3}{R^3} \cdot 100\% = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \cdot 100\% = 74\%$$

Wie funktioniert eine metallische Bindung, z.B. in einem Metall wie Gold, aber auch in den Legierungen?

- Das Modell der metallischen Bindung beruht auf Vorstellung zur Erklärung der **elektrischen Leitfähigkeit**, weil das die wichtigste Eigenschaft von Metallen ist.

Grundfrage: Was muss es **in** einem Metall geben, damit es den elektrischen Strom leiten kann? Es muss Ladungsträger geben, die in dem Metall beweglich sind.
(Hypothese)

- Es hat sich dann gezeigt, dass diese beweglichen Ladungsträger in dem Metall **einige** der Elektronen der Metallatome sind.
- Mit dieser Information wurde dann das Modell des "Elektronengases" in dem metallischen Festkörper entwickelt.



Wie erklärt man mit diesem Modell die Bindung zwischen den Teilchen eines Metalls?

"Bindung" bedeutet, dass es zwischen den Teilchen eine starke Anziehungskraft gibt, die mit den gleichzeitig vorhandenen Abstoßungskräften ein Gleichgewicht bildet).

--> kann man erklären, wieso diese Elektronen von den Metallatomen freigegeben werden, aber von den Nichtmetallatomen nicht?

Die Antwort findet man mithilfe des Bohr-Sommerfeld-Atommodells (=Orbitalmodell) und mithilfe des PSE.

- Die Metalle sind Elementen der IV, V, VI und VII Periode (5 Ausnahmen: Li, Be, Na, Mg, Al). D.h. ihre Außenelektronen befinden sich auf sehr hohen Energieniveaus (mit geringen Energieunterschieden), fast "an der Grenze" des Atoms.

Das bedeutet, dass die Elektronen nur kleine Mengen von Wärmeenergie, die sie von Außen aufnehmen können, benötigen, um die Grenze der maximalen Energie eines gebundenen Elektrons zu überschreiten. Dann sind sie "frei" und können sich zwischen den Atomen des Metalls bewegen. (--> Festkörperphysik: "Leitungsband" und "Valenzband")

Vergleich der Verformbarkeit von metallischen und ionischen Stoffen

Bei den metallischen und ionischen Stoffen gibt es einen großen Strukturunterschied: Während die Metalle aus positiven, ortsfesten Atomrümpfen bestehen, zwischen denen sich freie Elektronen ähnlich wie ein Gas bewegen, sind die ionischen Verbindungen aus ortsfesten Anionen und Kationen gebaut, die abwechselnd angeordnet sind und ein Ionengitter bilden.

Wenn auf die Kristallgitter jeweils eine Kraft ausgeübt wird, dann entstehen aufgrund dieses Strukturunterschieds unterschiedliche Wirkungen:

- Bei dem Metall werden Atomrümpfe, die das Gitter bilden, verschoben. Dabei bewegen sich die Elektronen des Elektronengases mit den Atomrümpfen, sodass die Anziehungskraft zwischen dem Elektronengas und den Atomrümpfen erhalten bleibt.
- Bei der ionischen Verbindung werden sowohl die Anionen wie auch die Kationen gegeneinander verschoben, dadurch liegen gleich geladene Ionen nebeneinander. Zwischen ihnen entsteht eine große (elektrische) Abstoßungskraft und der Ionenkristall zerfällt in viele kleine Stücke.

Man sagt: Metalle sind verformbar; Ionenverbindungen sind spröde.

Kristallstrukturen von Ionenverbindungen

Größenvergleich von Atomen und Ionen der Hauptgruppen

Die Größe der Atome der Hauptgruppenelemente ändert sich kontinuierlich: Sie nimmt von unten nach oben und von links nach rechts ab. Deshalb ist z.B. ein Fluoratom sehr viel kleiner als ein Natriumatom.

Bei den Ionen muss man zwischen den Anionen und den Kationen unterscheiden: normalerweise sind die Anionen um ein Vielfaches größer als Kationen.

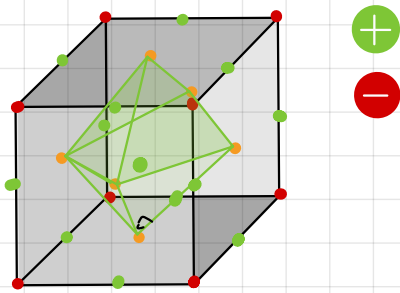
Die Struktur einer kristallinen Ionenverbindung mit einem kfz. Basisgitter

Basisgitter:

- wird von den großen Ionen gebildet
- besteht aus den Gitterplätzen: 8 Eckpositionen, 6 Flächenmitten

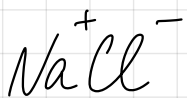
Lückenpositionen werden von den kleinen Ionen besetzt.

Sie befinden sich auf den Kantenmitten:



auf den Kantenmitten: 12
und im Raumzentrum: 1

Insgesamt 27 Teilchen, die nur teilweise in der EZ sind.



1. Berechnen Sie die Dichte der EZ

$$R(\text{Cl}^-) = 181 \text{ pm}$$

$$R(\text{Na}^+) = 95 \text{ pm}$$

$$M(\text{Na}) = 22,99 \text{ g/mol}$$

$$M(\text{Cl}) = 35,45 \text{ g/mol}$$

$$f = 4R(\text{Cl}^-)$$

$$f^2 = 2a^2$$

$$f = \sqrt{2}a$$

$$a = \frac{f}{\sqrt{2}} = \frac{4}{\sqrt{2}} R(\text{Cl}^-) = 2\sqrt{2} R(\text{Cl}^-)$$

$$\rho(\text{Na}^+\text{Cl}^-) =$$

$$1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$$

$$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$$

$$= \frac{N(\text{Na}^+) \cdot M(\text{Na}) + N(\text{Cl}^-) \cdot M(\text{Cl})}{N_A \cdot (2\sqrt{2} R(\text{Cl}))^3} = 2,893 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

$$2,1615$$

$$+ 33,84\%$$

$$R(\text{Anion})$$

Die beiden Werte stimmen nur ungefähr überein. Offensichtlich funktioniert das Modell, das der Berechnung zugrunde liegt, für diese Verbindung nicht perfekt. Es muss noch weiter entwickelt werden.

MA

die Dichte von $\text{Mg}^{2+}\text{O}^{2-}$

Struktur: kfz. EZ.

$$R(\text{O}^{2-}) = 140 \text{ pm}$$

$$R(\text{Mg}^{2+}) = 55 \text{ pm}$$

$$\rho(\text{Mg}^{2+}\text{O}^{2-}) = 3,6 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

