

Zusammenfassung Allgemeine Chemie I (AC)

1. Grundlagen

1.1. Massen / Mol etc.

$$n = \frac{m}{M} = c_L * V_L$$

$$wt\% (E) = \frac{m(E)}{m_{tot}} * 100\%$$

1.2. Konzentrationen/Volumen

$$c_e = \frac{m_e}{V_L}$$

$$V_e = \frac{m_e}{\rho_3}$$

1.3. Ideale Gasgleichung

$$pV = nRT$$

$$R = 8,31 J mol^{-1} K^{-1}$$

1.4. Chemisches Gleichgewicht



$$K = \frac{(a_C)^c \cdot (a_D)^d}{(a_A)^a \cdot (a_B)^b}$$

$$a_i = \frac{\gamma_i * m_i}{m_i^0} = \frac{\gamma_i * C_i}{C_i^0}$$

für verdünnte Lösungen gilt $\gamma_i = 1$. Daraus folgt:

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

1.5. Mathematik

Lösung Quadratische Gleichung

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

weitere wichtige Rechenregeln

$$(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$$

2. Säuren/Basen

2.1. Definitionen

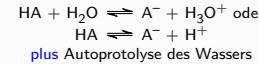
Säure = Protonendonator

Base = Protonenakzeptor

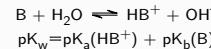


2.2. schwache (einprotonige) Säuren & Basen in Wasser

Säuren:



Basen:



Erhaltungssätze:

$$\begin{aligned} [HA]_{\text{zugeg.}} &= [A]_{\text{tot}} = [HA] + [A^-] \\ [H^+]_{\text{tot}} &= [HA]_{\text{zugeg.}} + [OH^-]_{\text{zugeg.}} \end{aligned}$$

Protonenherkunftsgleichung:

$$[H^+] = [A^-] + [OH^-]$$

Gleichgewichtskonzentrationen für monoprotonige Säuren:

$$\begin{aligned} [H^+]^3 + [H^+]^2 K_a - [H^+]([HA]_{\text{tot}} K_a + K_w) - K_w \cdot K_a &= 0 \\ pH &= pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]} \end{aligned}$$

falls $[OH^-] \ll [A^-]$ und nicht vollständig dissoziert:

$$\begin{aligned} [H^+]^2 + [H^+] K_a [HA]_{\text{tot}} K_a &= 0 \\ pH &= pK_a + \log \frac{[H^+]}{[HA]_{\text{tot}} - [H^+]} \end{aligned}$$

falls $[OH^-] \neq [A^-]$ und vollständig dissoziert:

$$\begin{aligned} [H^+]^2 + [H^+] K_a - [HA]_{\text{tot}} K_a &= 0 \\ pH &= pK_a + \log \frac{K_a}{[H^+]} \end{aligned}$$

falls $[H^+] \ll [HA]_{\text{tot}}$: quadratische Gleichung (Näherungsformel für $c = 1 \text{ mol} - 1 \text{ mmol}$):

$$\begin{aligned} [H^+] &= \sqrt{K_a [A]_{\text{tot}}} \\ pH &= \frac{1}{2} (pK_a - \log [A]_{\text{tot}} / \text{zugeg.}) \end{aligned}$$

→ pH für starke Säuren:

$$pH = -\log[H^+]$$

→ Abweichungen zwischen pH-Werten aus Näherungsformel und aus Quadratischer Gleichung nehmen mit zunehmender Verdünnung zu.

Rezept pH- Wert Berechnung

1. Reaktionsgleichungen aufstellen
2. Gleichgewichtskonstanten formulieren
3. Massenbilanz aufstellen
4. Protonenherkunftsgleichung aufstellen
5. Vereinfachen
6. Gleichung nach $[H^+]$ auflösen
7. pH- Wert berechnen

Dissoziationsgrad α

$$\alpha = \frac{[\text{deprot. Formen}]}{[\text{alle Formen}]} = \frac{[A^-]}{[A]_{\text{tot}}}$$

$$\alpha = \frac{K_a}{K_a + [H^+]} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 + \frac{4[A]_{\text{tot}}}{K_a}}}$$

pKa Werte Säurestärke nimmt mit abnehmendem pKa-Wert zu.

2.3. monologarithmische Verteilungsdiagramme ein- bis dreiprotoniger Säure

für $H_3A \rightleftharpoons H_2A^- \rightleftharpoons HA^{2-} \rightleftharpoons A^{3-}$ gilt

$$\alpha_0 = \frac{[A^{3-}]}{[A]_{\text{tot}}}; \alpha_1 = \frac{[HA^{2-}]}{[A]_{\text{tot}}}; \alpha_2 = \frac{[H_2A^-]}{[A]_{\text{tot}}}; \alpha_3 = \frac{[H_3A]}{[A]_{\text{tot}}}$$

und $\alpha_3 + \alpha_2 + \alpha_1 + \alpha_0 = 1$

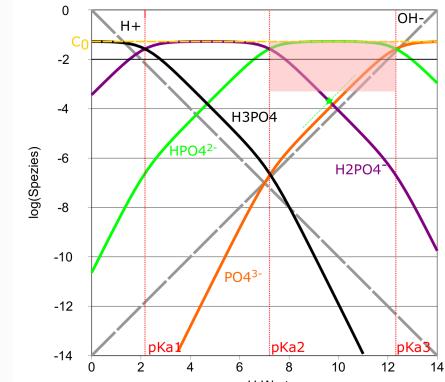
α_i in Abhängigkeit des H^+ (pH) und $K_{a,i}$. Kreuzungspunkte der Spezieskurven in den Punkten $pH = pK_{a,i}$. In diesen Punkten auch gleiche Anteile der beiden Spezies.

2.4. Zweifachlogarithmische Verteilungsdiagramme

Rezept Sillén Diagramm (zweiprotonige Säure)

1. H^+ und OH^- Diagonalen eintragen
 2. Log(totale Konzentration) eintragen (horizontale linie)
 3. pK_a Werte eintragen
- H_2A vollständig protoniert: Von 0 bis zum Systempunkt. Danach setzt Deprotonierung ein → $m = -1$ bis zum 2. pK_a danach $m = -2$)
- H_2A^- Steigung $m = 1$ für $0 < pH < pK_{a,1}$, $m = 0$ für $pK_{a,1} < pH < pK_{a,2}$ und $m = -1$ rest
- A^{2-} entsprechend $[H_2A^-]$ aber umgekehrt
4. Doppelte Konzentration berücksichtigen (Verschieben der Kurve um 0,3)

Beispiel: pH- Bestimmung: $HPO_4^{2-}, 0,063 \text{ M}$ in wässriger Lösung



1. $H_3PO_4 \rightleftharpoons H^+ + H_2PO_4^- \rightleftharpoons 2H^+ + HPO_4^{2-} \rightleftharpoons 3H^+ + PO_4^{3-}$
2. PHG: In der PHG kommt die zugegebene Spezies nicht vor, da der verbleibende Teil dem System weder H^+ Ionen zu Verfügung stellt noch entzieht. Spezies, welche dem System (bei der Bildung ausgehend vom zugegebenen Stoff) n Protonen zu Verfügung stellen, werden n mal addiert. Spezies, welche zur Bildung n Protonen benötigen, werden n mal subtrahiert.

$$\rightarrow [H^+] = -2[H_3PO_4] - [H_2PO_4^-] + [PO_4^{3-}] + [OH^-]$$

3. Vernachlässigen: Vernachlässigt können alle Spezies werden, die in mindestens 10 bis 100-fach geringerer Konzentration (= 1 bis 2 Einheiten im Diagramm) vorliegen als die Konzentration der beigegbenen Spezies im zu erwartenden pH Bereich. Dies ist üblicherweise zwischen den zwei pKa Werten, welche die hohe Konzentration der zugegebenen Spezies umschließen. → allen Spezies, welche den rot schraffierten Bereich nicht berühren, können wegen zu geringer Konzentration vernachlässigt werden. $[H_3PO_4], [H^+]$

4. PHG vereinfachen: $[H_2PO_4^-] = [PO_4^{3-}] + [OH^-]$
5. Konzentrationsunterschied aus Diagramm ablesen (vertikaler Abstand der beiden Kurven im erwarteten pH Bereich: $10^{[PO_4^{3-}] + [OH^-]} = 10^{0.5} = 3.162$)
6. $[PO_4^{3-}] = 3.162[OH^-]$ einsetzen in vereinfachte PHG
7. $[H_2PO_4^-] = 4.162[OH^-]$ (= gesuchter Schnittpunkt)
8. Linie parallel zu $[OH^-]$ mit Abstand $\log(4.162)$ einzeichnen (grün gestrichelt).
9. pH am Schnittpunkt ablesen (grüner Stern)

Ergänzung für Systeme mit zwei verschiedenen beigegebenen Stoffen:
Wird die Lösung von zwei Stoffen gesucht (z.B. H_2A und B), so muss zuerst das Gleichgewicht zwischen den beigegebenen Stoffen aufgestellt werden: $H_2A + 2B \rightleftharpoons A^{2-} + 2HB^+$. Anschließend schaue, ob das Gleichgewicht dieser Reaktion links oder rechts liegen kommt. Dazu pK_a Werte der beiden Stoffen betrachten (→ Welches ist die stärkere Säure?). Bei unterschiedlichen Konzentrationen $[A]_{\text{tot}}$ und $[B]_{\text{tot}}$ diese berücksichtigen (d.h. liegt eine Spezies in höherer Konzentration vor, dann ist die GGW der Reaktion auf der anderen Seite liegen kann). Anschließend wird - ausgehend von der Verbindung, die hauptsächlich vorliegt - die PHG aufgestellt und wie oben vorgegangen. (→ liegt im Beispiel das GGW rechts, so wird die PHG ausgehend von $(HB^+)_2 A^{2-}$ aufgestellt.)

2.5. Puffer

Pufferlösungen enthalten ein konjugiertes Säure- Base- Paar. Solche Lösungen, die durch Zugabe von HA und A^- hergestellt wurden, gilt:

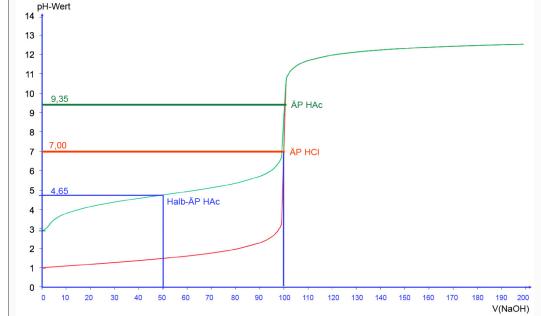
$$pH = pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]} \approx pK_a + \log \frac{[A^-]_{\text{zg}}}{[HA]_{\text{zg}}}$$

Puffergebiet

$$pH = pK_a \pm 1 \rightarrow 0.1 < [A^-]/[HA] < 10$$

2.6. Titration

Die Titration ist eine analytische Methode zur Bestimmung des Säure- resp. Basegehalts einer Lösung. Das schnelle erreichen von Gleichgewichten wird zur Konzentrationsbestimmung benutzt.



Neutralisationsgrad

$$a = \frac{n(OH^-)_{\text{zg}}}{n(HA)_{\text{zg}}} = \frac{[OH^-]_{\text{zg}}}{[HA]_{\text{zg}}}$$

Titration einer starken Säure (HCl) mit einer starken Base: Am Äquivalenzpunkt AP(HCl) ist gleichviel Base zugegeben worden, wie Säure vorliegt (-i Vollständige Neutralisation). pH = 7 gilt nur für starke Säuren. Die Kurve geht für hohe zugegebene Volumina asymptotisch an den pH der Base.

Titration einer schwachen Säure (HAc):

Der (oder die) AP liegt in der Mitte des steilen Stücks. Dadurch ist der pH am AP konzentrationsabhängig! Der pK_a befindet sich bei $a=0.5$. Das Puffergebiet ist im "flachen" Bereich der Titrationskurve zu finden ($pH=pK_a \pm 1$).

2.7. Qualitative Einflüsse auf die Säurestärke

- Die Oxidationsstufe des Zentralatoms bei Hydroxido(oxido)säuren (Oxosäuren) erhöht die Polarisierung der OH-Bindung und die höhere Anzahl O-Atome stabilisiert die konjugierte Base durch Delokalisierung der negativen Ladung.
- Die abnehmende E-H Bindungsstärke (Bindungsenergie) bei zunehmender Ordnungszahl erklärt den abnehmenden pK_{a1} -Wert in der Serie.
- In der Serie der Wasserstoffhalogenide HF, HCl, HBr, HI nimmt die Säurestärke zu und HF ist deutlich die schwächste Säure. Die Polarierbarkeit der Halogenidionen (Mass für die Deformierbarkeit der Elektronenhülle) nimmt mit dem Ionenradius zu: Stabilisierung der konjugierten Base.
- Die Bildung von intramolekularen Wasserstoffbrücken kann bei Carbonsäuren relevante pK_a -Verschiebungen hervorrufen.
- Der negative induktive Effekt (-I, Elektronenzug durch σ -Bindungen) erhöht die Stärke einer Carbonsäure. Der Elektronenzug, hervorgerufen durch elektronegative Substituenten, vermindert die Elektronendichte am Sauerstoffatom und stabilisiert die konjugierte Base.
- Die Elektronendelokalisation (Resonanz / Mesomerie) kann die konjugierte Base stabilisieren und erhöht somit die Säurestärke.

2.8. Aciditätsfunktionen und Supersäuren

$$H_0 = \log \frac{\gamma_{HB^+}}{\gamma_B} + pH$$

$$H_0 = pK_a(HB^+) - \log \frac{[HB^+]}{[B]}$$

Aciditätsüberschuss

$$X = \log \left(\frac{\gamma_B \gamma_{H^+}}{\gamma_{HB^+}} \right)$$

3. Redox

3.1. Definitionen

Oxidation: Erhöhung der Oxidationszahl, Abgabe von Elektronen
Reduktion: Verringerung der Oxidationszahl, Aufnahme von Elektronen
Oxidationsmittel: Substanzen, die bei anderen Stoffen eine Oxidation bewirken. Es wird selbst reduziert.

Reduktionsmittel: Substanzen, die bei anderen Stoffen eine Reduktion bewirken und dabei selbst oxidiert wird.

Oxidationszahl (OZ):

- Bei monoatomaren Ionen entspricht die OZ der Ionenladung
- Bei Molekülen / Molekülionen werden bei jeder Bindung die bindenden Elektronen dem elektronegativeren Bindungspartner formal zugeschlagen. Die OZ jedes Atoms entspricht der daraus resultierenden Ladung.
- Bei zwei oder mehr Bindungspartnern setzt sich die OZ des Zentralatoms aus der Summe der Beiträge der einzelnen Bindungspartner zusammen.
- Bei Bindungen zwischen gleichen Elementen ist der Beitrag zur OZ gleich 0.
- Die Summe der OZ aller Atome in einem Molekül entspricht der effektiven Ionenladung.
- Beispiele: $H_2O, H_2^{(+1)}O^{(-1)}$; $CH_4, C^{(-1V)}H_4^{(+1)}$

3.2. Elektronegativität

Gibt an, wie stark ein Atom in einem Molekül Elektronen auf sich zieht.

$$\chi^P(Y) - \chi^P(X) = \sqrt{\Delta D}$$

$$\Delta D = D(X - Y) - \left\{ \frac{1}{2} [D(X - X) + D(Y - Y)] \right\}$$

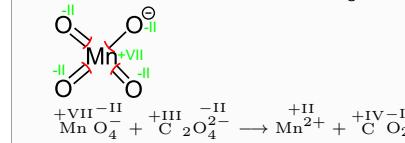
$\chi^P(X)$ Elektronegativität des Elements X
D Bindungsdissoziationsenthalpie

EN-Trend im PSE: EN-Werte nehmen nach rechts oben zu.

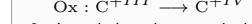
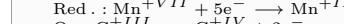
3.3. Redox-Reaktionen abgleichen

Beispiel: Abgleichen von $MnO_4^- + C_2O_4^{2-} \rightarrow Mn^{2+} + CO_2$

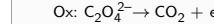
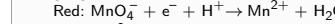
1. Oxidationszahlen aller Atome bestimmen gemäß Abschnitt 3.1:



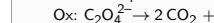
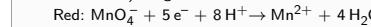
2. Halbzellengleichungen aufstellen



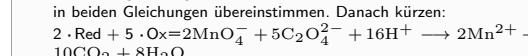
3. Je nach dem ob sauer oder basisch/neutral abgeglichen werden muss, Halbzellengleichungen mit H^+/H_2O resp. OH^-/H_2O (und weiteren Spezies die in der Reaktion vorkommen) abgleichen. Die fehlenden Atome (H^+, OH^- resp. H_2O) kommen meist aus dem Lösungsmittel (Wasser). Im Beispiel kann gewählt werden, wir wählen saure Bedingungen.



4. Halbzellengleichungen durch längeres Betrachten oder LGS (siehe Abschnitt 3.8) ausgleichen:



5. Halbzellengleichungen addieren. Dazu müssen die Anzahl elektronen in beiden Gleichungen übereinstimmen. Danach kürzen:



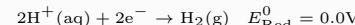
3.4. Galvanische Zellen

Spontan ablaufender Netto-Redox Prozess läuft nur in eine Richtung spontan ab. Die Oxidation von elementarem Zink zu $Zn^{+II}(aq)$ durch Kupfersulfat ($Cu^{+II}SO_4$) wobei $Cu^{+II}(aq)$ zu elementarem Kupfer reduziert wird ist hierzu ein typisches Beispiel.

Elektromotorische Kraft (EMK / S-Zellspannung")

$$E_{Zelle} = E_{Ox} + E_{Red}$$

Nur die Summe E_{Zelle} der beiden Halbzellenspannungen ist bekannt. Die **Bezugshalbzelle** ist definiert als



Ein Halbzelloxidationspotential hat dasselbe Reduktionspotential wie die Reduktionshalbzelle, einfach mit **umgekehrtem** Vorzeichen. Ein grosses (positives) Standard-Reduktionspotenzial bedeutet, dass sich die betreffende Substanz leicht reduzieren lässt.

Beispiel:

3.5. EMK und Gleichgewichtskonstante (Nernst-Gleichung)

$$aOx_A + bRed_B \rightarrow a' Red_A + b' Ox_B$$

$$Q = \frac{[Red_A]^{a'} [Ox_B]^{b'}}{[Ox_A]^a [Red_B]^b}$$

$$E_{Zelle} = E_{Zelle}^0 - \frac{RT}{zF} \ln Q \quad \text{bzw.}$$

$$E_{Zelle} = E_{Zelle}^0 - \frac{0.059V}{z} \log Q \quad \text{bei } T = 298.15K$$

$$\ln K = \frac{zFE_{Zelle}^0}{RT}$$

$$\log K = \frac{zFE_{Zelle}^0}{0.059V} \quad \text{bei } T = 298.15K$$

3.6. Disproportionierungsreaktionen

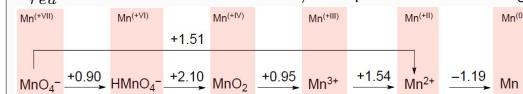
Eine Spezies wird gleichzeitig reduziert und oxidiert. Beispiel Disproportionierung von Manganat:



Das Elektrodenpotential kann wieder durch das addieren der beiden beteiligten Halbzellenreaktionen berechnet werden.

3.7. Potenziadiagramme

3.7.1. Latimer-Diagramme
Dienen dem Vergleich verschiedener Halbzellreaktionen eines einzelnen Elements. Darstellung aller Redoxpaare mit den zugehörigen Standardreduktionspotentialen E_{red}^0 .



Die Potentiale zweier nicht benachbarter Redoxpaare berechnen sich als

$$c\Delta_r G^0 = \Delta_r G_{(1)}^0 + \Delta_r G_{(2)}^0$$

$$-zFE^0 = -z_{(1)}FE_{(1)}^0 - z_{(2)}FE_{(2)}^0$$

$$\Rightarrow E^0 = \frac{z_{(1)}E_{(1)}^0 + z_{(2)}E_{(2)}^0}{z_{(1)} + z_{(2)}}$$

3.8. Reaktionsgleichungen systematisch ausgleichen:

Beispiel: $MnO_4^- + e^- + H^+ \rightarrow Mn^{2+} + H_2O$ soll ausgeglichen werden. Dazu Matrix schreiben mit den Spezies in den Spalten und den Atomen in den Zeilen. Der Einfachheit halber Spezies als a, b, c,... abkürzen.

	$MnO_4^- + a$	$e^- + b$	$H^+ + c$	$Mn^{2+} + d$	$H_2O + e$
<i>Mn</i>	1	0	0	1	0
<i>O</i>	4	0	0	0	1
<i>H⁺</i>	0	0	1	0	2
<i>Ladungen</i>	-1	-1	1	2	0

Danach entweder

a) Gleichungen aufstellen und lösen

$$a = d \quad (1)$$

$$4a = e \quad (2)$$

$$c = 2e \quad (3)$$

$$2a - b + c = 2d \quad (4)$$

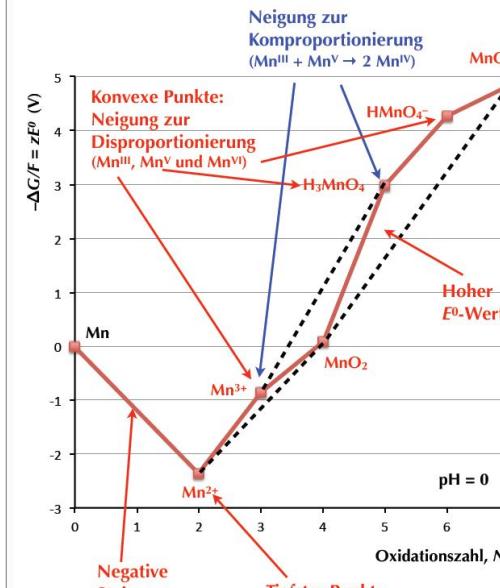
oder

b) Matrix so umformen, dass sie als lineares Gleichungssystem (im Taschenrechner oder mittels Gaussverfahren) gelöst werden kann (alle Spalten der rechten Seite bis auf die letzte nach links nehmen (und Vorzeichenwechsel nicht vergessen). In diesem Fall Spalte d):

1	0	0	-1	0
4	0	0	0	1
0	0	1	0	2
-1	-1	1	-2	0

Ergibt die stöchiometrischen Koeffizienten a bis d. e kann danach einfach bestimmt werden.

In beiden Fällen ergibt sich $a = 1$ (frei gewählt), $b = 5a$, $c = 8a$, $d = 1$ und $e = 4$ und somit $MnO_4^- + 5e^- + 8H^+ \rightarrow Mn^{2+} + 4H_2O$

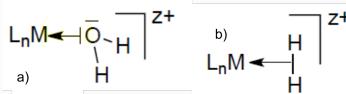


Dabei ist die Spezies mit $OZ = 0$ jeweils der Ausgangszustand. Das $\Delta G^0 = 0$ wird basierend auf der Thermodynamik bestimmt. Für die Lage der Punkte jeweils $\frac{-\Delta G^0}{F} = \frac{z}{E^0}$ berechnen. Für höhere Oxidationszustände die vorangehenden addieren.

4. Ich krieg gleich Komplexe

4.1. Definitionen

Ein Metallkomplex besteht aus einem **Metallzentrum** und einer variablen Anzahl **Liganden**. Er kann neutral oder geladen sein, je nach Oxidationsstufe des Metallzentrums und Anzahl geladener Liganden. Liganden können monoatomare Ionen, neutrale Moleküle oder Molekülionen sein. Die Ligandatome, die in direkter Wechselwirkung mit dem Metallzentrum stehen, bilden die (erste) Koordinationsphäre; ihre Anzahl ist die **Koordinationszahl (KZ)**. Die räumliche Anordnung der Ligandatome entspricht der **Koordinationsgeometrie**. Um eine Bindung mit einem Metallzentrum einzugehen, muss ein Ligand grundsätzlich ein Elektronenpaar zur Verfügung stellen können (Lewis-Base). Dabei handelt es sich meist um a) nicht-bindende, weniger häufig um b) bindende Elektronenpaare:

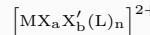


- **monodentat**: Ligand, der mit einem Atom an das Metallzentrum gebunden ist.
- **bi-, tri-, polydentat**: Liganden, bei denen zwei, drei oder mehrere Atome an das Metallzentrum binden. Auch als **Chelatliganden** bezeichnet. Chelatliganden bilden zusammen mit dem Zentralatom einen **Chelatingring**.

4.1.1. Schreibweise

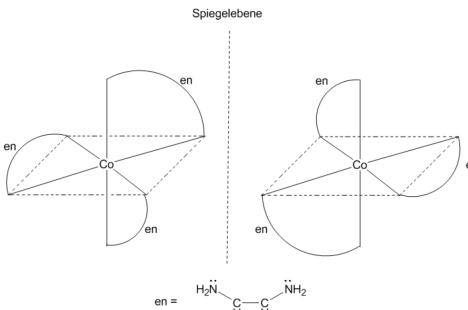
- Ein Komplex wird in eckigen Klammern angegeben; Gesamtladung ausserhalb der Klammern.
- Geladene Liganden (X) werden in alphabetischer Reihenfolge zuerst angegeben, gefolgt von den neutralen (L) mit dem am Metall gebundenen Atom an erster Stelle (OH_2 statt H_2O). In allgemeinen Formulierungen wird häufig L als einzige Bezeichnung für alle Liganden verwendet.
- Positiv geladene Gegenionen werden vor, negativ geladene nach der Komplexeckklammer angegeben
- Die Angabe der Oxidationsstufe des Metallzentrums ist fakultativ.

Beispiel Scheinweise:

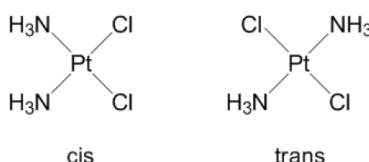


4.2. Konfigurationsisomerie

Enantiomere: Verhalten sich wie Bild und Spiegelbild. Bild und Spiegelbild dürfen nicht identisch sein (d.h. sie sind **Chiral**).



Diastereomere: Verhalten sich nicht wie Bild und Spiegelbild. D.h. eine Konfiguration lässt sich nicht durch Spiegelung in die andere überführen.



4.3. Koordinationschemie

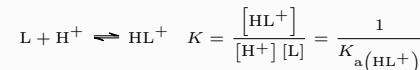
4.3.1. Stufenweise Komplexbildung mit basischen Liganden



Die Komplexbildungsreaktionen können beschrieben werden als:



Die Protonierung von L wird zu



Es folgt daraus der Erhaltungssatz für M:

$$[\text{M}]_{\text{tot}} = [\text{M}] + [\text{ML}] + [\text{ML}_2] + \dots + [\text{ML}_n] + \dots + [\text{ML}_N]$$

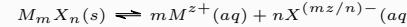
(N max. KZ)

$$[\text{M}]_{\text{tot}} = [\text{M}] \cdot \left\{ 1 + \sum_{n=1}^N \beta_n [\text{L}]^n \right\}$$

$$1 + \sum_{n=1}^N \beta_n [\text{L}]^n = \alpha_L \quad \text{Verteilungskoeffizient}$$

4.3.2. Löslichkeit und Komplexbildung

Löslichkeitsprodukt: Gleichgewichtskonstante, verknüpft die maximal erreichbare Konzentration der entsprechenden Ionen in Lösung im Gleichgewicht mit dem Festkörper.



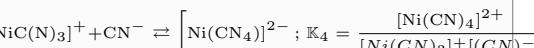
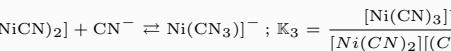
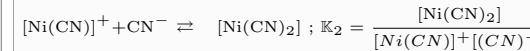
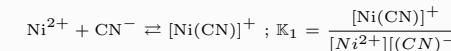
$$K_{SO} = [M^{z+}(aq)]^m \cdot [X^-(aq)]^n$$

4.4. Valenz- Elektronenkonfiguration bei Übergangsmetallen

- Die Anzahl Valenzelektronen (VE) eines Metalls entspricht der Gruppennummer im Periodensystem.
- Die Metallatome in ihrem Grundzustand haben eine Elektronenkonfiguration, die vom Aufbauprinzip gegeben ist (siehe ACIPC). Hier gibt es aber Unregelmäßigkeiten, z. B. in der Gruppe 10: Ni: [Ar]4s₂3d₈; Pd: [Kr]5s₀4d₁₀; Pt: [Xe]6f₁₄6s₁5d₉
- Bei Übergangsmetallionen werden die verbleibenden Valenzelektronen den fünf d-Orbitalen zugeschrieben (die Energieniveaus der nd-Orbitale liegen unter dem des (n+1)s-Orbitals).

4.5. Stufenweise Komplexbildung: Bruttostabilitätskonstante

Beispiel: Bildung des Tetracyanonickelat(II)-Komplexes $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$



$$\beta_1 = K_1, \beta_2 = K_1 * K_2$$

$$\beta_3 = K_1 * K_2 * K_3, \beta_4 = K_1 * K_2 * K_3 * K_4$$

Weiter gelten die Erhaltungssätze ($[\text{Cd}]_{\text{tot}} = \dots = [\text{Cd}]_{\text{zugeg.}}$)