

Umweltmikrobiologie

npikall

11.03.2025

Inhaltsverzeichnis

1 Atombau und chemische Bindungen	3
1.1 Atommassen	3
1.2 Atomaufbau	3
1.3 Isotope	3
1.4 Das Mol als Mengeneinheit	3
1.5 Atomhülle	3
1.5.1 Bohrsches Atommodell	3
1.5.2 Quantenmechanische Atommodelle	4
1.5.3 Atomorbitale	4
1.6 Elektronenkonfiguration	4
1.7 Periodensystem	4
1.7.1 Periodische Eigenschaften	4
1.8 Chemische Bindungstypen	5
1.8.1 Ionische Bindung	5
1.8.2 Kovalente Bindung	5
1.8.3 Molekülorbital Theorie	5
1.8.4 Metallische Bindung	5
1.8.5 Oxidationszahl	5
2 Zustandsformen der Materie	6
2.1 Gasgesetze	6
2.1.1 Gesetz von Boyle und Mariotte (Temperatur, isotherm)	6
2.1.2 Gesetz von Charles (Druck, isobar)	6
2.1.3 Gesetz von Gay-Lussac (Volumen, isochor)	6
2.1.4 Gesetz von Avogadro	6
2.2 Allgemeine Gasgleichung	6
2.3 Gasmischungen	6
2.4 Reale Gase	7
2.5 Wechselwirkungen	7
2.6 Dampfdruck und Siedepunkt	7
2.7 Flüssigkeitsmischungen	7
2.7.1 Lösungen	7
3 Stöchiometrie und chemisches Rechnen	7
3.1 Konzentrationsmaße	7
3.2 Verdünnen und Mischen	8
3.2.1 Mischungsgleichung	8
3.3 Chemische Reaktionen	8
4 Triebkraft chemischer Reaktionen	8

4.1 Energiebilanzen	8
4.2 Enthalpie	9
4.3 Entropie	9
4.4 Reaktionskinetik und -ordnung	9
5 Gleichgewichte	9
6 Säuren und Basen	9
7 Redoxreaktionen	9
8 Grundlagen der Anorganischen Chemie	9
9 Grundlagen der Organischen Chemie	9

1 Atombau und chemische Bindungen

1.1 Atommassen

Die *atomic mass unit* u ist wie folgt definiert (wobei $m_{C_{12}}$ die Masse eines C_{12} Atoms ist):

$$m_{\text{Atom}} = u = \frac{m_{C_{12}}}{12}$$

$$u = 1.6605402 \cdot 10^{-24} \text{ g}$$

Die *relative Atommasse* A_r gibt an wie viel Mal schwerer ein Atom ist als die atomare Masseneinheit.

$$A_r = \frac{m(X)}{u}$$

wobei A_r die *relative Atommasse* und $m(X)$ die *absolute Atommasse* ist.

1.2 Atomaufbau

Die chemischen Eigenschaften der Elemente werden hauptsächlich durch die Zahl der Elektronen bestimmt. Alle Atome des selben Elements haben dieselbe Ordnungszahl.

- **Ordnungszahl** (Z) \rightarrow # Elektronen = # Protonen
- **Massenzahl** (A) \rightarrow Summe der Protonen und Neutronen

${}^A_Z C \rightarrow$ Schreibweise für Ordnungs- und Massenzahl

1.3 Isotope

Isotope beschreiben Elemente, die sich nur durch eine verschiedene Anzahl der **Neutronen** unterscheiden. Die Protonen und Elektronen sind dabei gleich (sofern Element neutral).

Die im Periodensystem tabellierte Atommasse berücksichtigt das natürliche Isotopengemisch der Elemente, deshalb weicht der Wert von der ganzzahligen Nucleonenzahl ab.

1.4 Das Mol als Mengeneinheit

Ein Mol (SI-Einheit) bezeichnet $6.0221 \cdot 10^{23}$ Teilchen. Per Definition ist ein Mol so viele Teilchen wie Atome in 12 g des Kohlenstoffnuklids C_{12} enthalten sind.

Die *molare Masse* hingegen wird der Quotient aus Masse und Stoffmenge einer Stoffportion bezeichnet. Dabei stimmt der Zahlenwert mit dem Wert für die Masse eines Teilchens in der Einheit u überein, sofern die molare Masse in der Einheit $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ angegeben ist. Es ist die Molmasse gleich der relativen Atommasse. Somit ist die Stoffmenge n also:

$$n [\text{mol}] = \frac{m[\text{g}]}{M[\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}]}$$

1.5 Atomhülle

Die experimentelle Grundlage zur Ermittlung der Struktur der Atomhülle bilden die Atomspektren (diskontinuierlich, Linien Spektren).

1.5.1 Bohrsches Atommodell

Bohr postulierte eine Schalenstruktur für die Struktur der Atomhülle. Bei Energiezufuhr springen Elektronen auf höhere Schalen und springen nach 10^{-8}s in den Grundzustand zurück.

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu$$

Die Hauptquantenzahl dient zur Kennzeichnung der Schalen. In jeder Schale haben $2 \cdot n^2$ Elektronen platz.

1.5.2 Quantenmechanische Atommodelle

Das Bohr'sche Atommodell versat allerdings nach den Wasserstoff-Atom. Deshalb gibt es eine bessere Beschreibung durch das quantenmechanische Atommodell (1929 durch Erwin Schrödinger). Dabei können Elektronen gleichzeitig als Partikel als auch als Welle betrachtet werden. Dabei besteht folgender Zusammenhang:

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot \nu}$$

Dabei ist h das Planck'sche Wirkungsquantum ($6.63 \cdot 10^{-34}$)

1.5.3 Atomorbitale

Jedes atomorbital lässt sich durch 4 Zahlen charakterisieren.

- Hauptquantenzahl (Energieniveaus)
- Nebenquantenzahl (Gestalt des Orbitals im Raum)
- magnetische Quantenzahl m (Orientierung der Orbitale im Raum)
- Spinquantenzahl m_s (Orientierung des Eigendrehimpuls)

Da Quantenzahlen nicht beliebige Werte annehmen können, sind nur einige Kombinationen möglich. Die verschiedenen Orbitale werden durch die Buchstaben bezeichnet, wobei man auf die Begriffe der Spektroskopie s (sharp), p (principal), d (diffuse) und f (fundamental) zurückgreift. **Auffüllregel!!!**

1.6 Elektronenkonfiguration

...

1.7 Periodensystem

Schreibt man mit ansteigender Kernladungszahl die Elementsymbole mit ihren Elektronenkonfigurationen nebeneinander und beginnt eine neue Zeile, sobald die nächsthöhere Hauptquantenzahl ins Spiel kommt, ergibt sich das periodische System der Elemente, kurz Periodensystem, mit 18 Gruppen und 7 Perioden.

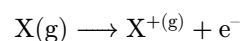
Eine Gruppe besteht aus untereinander stehenden Elementen mit gleicher Elektronenkonfiguration in der äußersten Schale (gleich viele Valenzelektronen). Diese Elemente weisen daher chemische Ähnlichkeiten auf.

1.7.1 Periodische Eigenschaften

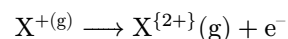
Der *Atomradius* nimmt innerhalb einer Periode (Zeile) ab. Die Kernladungszahl nimmt zu, die hinzukommenden Elektronen werden aber keine Schalen neu beginnen. Es entsteht eine Anziehung auf die Elektronenhülle und das Atom schrumpft.

Bei *Ionen* gibt es da allerdings auch ein spezielles Verhalten. Kationen (+) sind kleiner als ihre zugrundeliegenden Atome, denn Kernladung konzentriert sich auf geringere Elektronenzahl. Anionen hingegen sind größer.

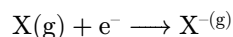
Die *Ionisierungsenergie* ist sehr eng mit der Elektronenkonfiguration verbunden. Es ist die Energie, die aufgewendet werden muss, um ein Elektron aus dem äußersten besetzten Orbital eines gasförmigen Atoms X zu entfernen. Dabei gilt für die erste Ionisierungsenergie:



und für die zweite Ionisierungsenergie:



Die *Elektronenaffinität* ist jene Energieänderung, die durch Besetzung des niedrigsten unbesetzten Orbitals in einem freien Atom durch ein Elektron resultiert:



Die meisten Elektronenaffinitäten haben ein negatives Vorzeichen, da bei der Aufnahme eines Elektron durch das Atom Energie freigesetzt wird.

Die *Elektronegativität* ist ein Maß für das Bestreben eines Atoms, in einer Verbindung die Bindungselektronen anzuziehen.

$$X_E = \frac{I + A}{2}$$

Dabei ist I die Ionisierungsenergie und A die Elektronenaffinität.

1.8 Chemische Bindungstypen

Es gibt grundsätzlich drei Bindungstypen:

- Kovalente Bindung oder Atombindung (Nichtmetall + Nichtmetall)
- Ionenbindung (Metall + Nichtmetall)
- Metallbindung (Elektronen werden abgegeben und befinden sich im Elektronengas)

1.8.1 Ionische Bindung

...

1.8.2 Kovalente Bindung

...

1.8.3 Molekülorbital Theorie

Die quantenmechanische Modellvorstellung erklärt die Atombindung als Überlappung der valenzelektronenorbitale zweier Atome.

...

1.8.4 Metallische Bindung

Metalle sind Wärme- und elektrisch leitfähig, verformbar (Duktilität) und weisen einen Oberflächen-glanz auf. Diese Eigenschaften können durch das Elektronengasmodell erklärt werden. Metalle bilden hochsymmetrische, dichte Packungen gleich großer Atome. Bei der plastischen Verformung gleiten die Kristallebenen aneinander ab.

1.8.5 Oxidationszahl

Die Oxidationszahl eines Elementes in einer chemischen Verbindung ist gleich der Differenz der Valenzelektronenanzahl dieses Elements (N_{Valenz}) und der Elektronenanzahl im jeweils betrachteten Zustand (N_{Zustand}).

$$OZ = N_{\text{Valenz}} - N_{\text{Zustand}}$$

Es gilt die folgende Elektronegativitätsreihe:

$$F > O > N \approx Cl > C \approx S > P \approx H > \text{Metalle}$$

2 Zustandsformen der Materie

2.1 Gasgesetze

2.1.1 Gesetz von Boyle und Mariotte (Temperatur, isotherm)

Gase sind komprimierbar. Misst man Druck und Volumen beim komprimieren (Temperatur konstant) das Produkt aus Druck und Volumen konstant ist.

$$p_1 \cdot V_1 = p_2 \cdot V_2$$

2.1.2 Gesetz von Charles (Druck, isobar)

Nun sei der Druck p konstant.

$$V_1 = V_2 \cdot \frac{T_1}{T_2}$$

2.1.3 Gesetz von Gay-Lussac (Volumen, isochor)

Es sei nun das Volumen konstant.

$$p_1 = p_2 \cdot \frac{T_1}{T_2}$$

2.1.4 Gesetz von Avogadro

Bei vorgegebenem Druck und vorgegebener Temperatur ist die Anzahl von Molekülen irgendeines Gases in einem bestimmten Volumen stets die gleiche. Die Zahl der Moleküle und damit auch die Zahl der Mole n ist dann dem Volumen des Gases proportional.

$$V_1 = V_2 \cdot \frac{n_1}{n_2}$$

2.2 Allgemeine Gasgleichung

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

Dabei ist R die allg. Gaskonstante mit $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$. Weiters ist n die Mol Anzahl. Um das molare Gasvolumen V_0 anzugeben braucht man einen Bezugspunkt (Normalbedingungen). Dabei sind der Druck $P = 1.013 \text{ bar} = 1 \text{ atm}$ und die Temperatur $T = 0^\circ \text{C} = 273.15 \text{ K}$.

$$V_0 = \frac{R \cdot T \cdot n}{P} = 22.41 \text{ L}$$

Weiters folgt daraus für die Dichte (Masse : $m = n \cdot M$):

$$d = \frac{n \cdot M}{V} = \frac{p \cdot M}{R \cdot T}$$

2.3 Gasmischungen

Das Gesamtvolumen V für eine Gasmischung ist bei gleichem Druck und gleicher Temperatur ist gleich der Summe der Einzelvolumina.

$$V_{Ges} = \sum_{i=0}^n V_i$$

Der Gesamtdruck lässt sich analog dazu bilden.

$$p = \sum_{i=0}^n p_i = \sum n_i \cdot \frac{R \cdot T}{V}$$

Somit ist ein partial Druck darstellbar durch (χ ist der Stoffmengenanteil oder Molenbruch)

$$p_A = \frac{n_A}{\sum n_i} \cdot \sum p_i = \chi_i \cdot P_{Ges}$$

2.4 Reale Gase

Tatsächlich zeigen alle Gase, wenngleich in unterschiedlichem Maße, Abweichungen vom idealen Verhalten; dies umso mehr, je tiefer die Temperatur und je höher der Druck ist. Die Abweichungen kommen durch Wechselwirkungen zwischen den Teilchen zustande. Quantitativ wird das Verhalten realer Gase durch die Van-der-Waals-Gleichung beschrieben; a und b sind dabei die Van-der-Waals-Koeffizienten, die experimentell für jeden Stoff ermittelt werden müssen:

$$\left(p + \frac{n^2 \cdot a}{V^2} \right) \cdot (V - n \cdot b) = n \cdot R \cdot T$$

2.5 Wechselwirkungen

...

2.6 Dampfdruck und Siedepunkt

Ist der Dampfdruck einer Flüssigkeit gleich dem Außendruck, so siedet die Flüssigkeit. Die zugehörige Temperatur heißt Siedepunkt (Sdp.) der Flüssigkeit. Der normale Siedepunkt einer Flüssigkeit entspricht der Temperatur, bei der der Dampfdruck gleich 1.013 bar ist (Atmosphärendruck). Die Temperatur einer siedenden Flüssigkeit bleibt - die nötige Energiezufuhr vorausgesetzt - konstant, bis die gesamte Flüssigkeit verdampft ist.

Die Clausius-Clapeyronsche-Gleichung beschreibt das Dampfdruckgleichgewicht einer Flüssigkeit in Abhängigkeit der Temperatur. Betrachtet man die Verdampfungsenthalpie ΔH_v eines Stoffes als konstant über einen Temperaturbereich T_1 bis T_2 , dann gilt für die integrierte Form:

$$\ln \frac{p_1}{p_2} = \frac{\Delta H_v}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

2.7 Flüssigkeitsmischungen

2.7.1 Lösungen

Sehr viele Stoffe lösen sich in Flüssigkeiten ohne chemische Reaktion: Es entstehen Lösungen. Die in der Mischung überwiegend vorhandene Komponente heißt Lösungsmittel. Man unterscheidet polare und unpolare Lösemittel. Die dielektrische Konstante K ist ein gutes Maß, um die Polarität und das Lösevermögen von Lösungsmitteln einzustufen.

...

3 Stöchiometrie und chemisches Rechnen

3.1 Konzentrationsmaße

Um die Menge der gelösten Substant („Solut“) in dem Lösungsmittel („Solvens“) anzugeben, sind verschiedene Konzentrationsmaße gebräuchlich. Wenn ein Volumen (V) enthalten ist, dann ist das Konzentrationsmaß temperaturabhängig. Den Zusammenhang zwischen Masse und Volumen stellt die Dichte (d) her. Damit ist d (oder ρ) ebenfalls temperaturabhängig. Hier ein kleiner Überblick:

- Stoffmengenanteil $\frac{n}{n}$
- Molalität ($\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$) $\frac{n}{m}$ (reines Lösungsmittel)
- Massenanteil $\frac{m}{m}$
- Molarität ($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$) $\frac{n}{V}$

- Gewichts-Volums-Anteil $\frac{m}{V}$
- Volumsanteil $\frac{V}{V}$

3.2 Verdünnen und Mischen

3.2.1 Mischungsgleichung

Beim Mischen bzw. Verdünnen von Lösungen wird zwar das Volumen vergrößert und die Konzentration erniedrigt, die Gesamtmenge (Masse) des gelösten Stoffes bleibt aber unverändert. Zwei Lösungen unterschiedlicher Konzentration, aber mit gleicher Gesamtmasse (m_{gesamt}) lassen sich damit folgendermaßen in Beziehung setzen:

$$m_1 \cdot w_1 + m_2 \cdot w_2 = (m_1 + m_2) \cdot w_3$$

$$w_3 = \frac{m_1 \cdot w_1 + m_2 \cdot w_2}{(m_1 + m_2)}$$

Das Buchstabe w steht dabei für die Massenprozent. Beim Verdünnen muss die Formel dementsprechend angepasst werden:

$$m_1 \cdot w_1 + m_x \cdot w_2 = (m_1 + m_x) \cdot w_3$$

$$\frac{m_1 \cdot w_1}{w_2} - m_1 = m_x$$

3.3 Chemische Reaktionen

Es gelten folgende Erhaltungsgrundlagen:

- Anzahl der Atome bleibt im System erhalten
- Ladung bleibt im System erhalten
- Masse bleibt im System erhalten

Entscheidend für das korrekte Aufstellen einer chemischen Reaktionsgleichung ist, die richtigen Formeln der Reaktionspartner und Produkte zu kennen. Dafür gibt es einige Regeln:

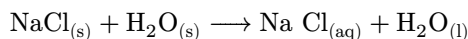
- Wasserstoff ist immer einwertig
- Natrium und Kalium sind immer einwertig
- Sauerstoff O_2 ist immer zweiwertig
- Stickstoff N_3 ist immer dreiwertig
- Kohlenstoff C_4 ist immer vierwertig
- Aluminium ist immer dreiwertig
- Eisen kann zweiwertig oder dreiwertig sein

4 Triebkraft chemischer Reaktionen

- Enthalpie, Entropie
- Wärmekapazität
- Aktivierungsenergie

4.1 Energiebilanzen

Man unterscheidet zwischen endothermen und exothermen Reaktionen. Bei endothermen Reaktionen wird dem System Energie zugeführt, während bei exothermen Reaktionen Energie freigesetzt wird. Das wohl bekannteste Beispiel für eine endotherme Reaktion ist das Schmelzen von Eis mit Hilfe von Kochsalz.



Die Messung der Reaktionswärme (RW) erfolgt im Kalorimeter, entweder unter konstantem Volumen oder Druck. Daher unterscheidet man zwischen RW bei konstantem Volumen ΔU und RW bei konstantem Druck ΔH . Weiters gilt nach dem 1. Hauptsatz der Thermodynamik, dass die Änderung der inneren Energie eines Systems der Summe der der am System verrichteten Arbeit und der Wärme Zu- und Abfuhr entspricht.

$$\Delta U = Q + w$$

Allgemein gilt:

$$\Delta U = \Delta Q + w = \Delta Q - p \Delta \cdot V = \Delta Q - \Delta n_g \cdot R \cdot T$$

Man kann dabei folgende Fälle unterscheiden:

- $\Delta V = 0$ Wenn das System sein Volumen nicht ändern, dann kann es auch keine Druck-Volumen-Arbeit leisten.
- $p = \text{const}$

4.2 Enthalpie

4.3 Entropie

4.4 Reaktionskinetik und -ordnung

5 Gleichgewichte

- Gleichgewichtskonstanten
- Massenwirkungsgesetz
- Löslichkeit

6 Säuren und Basen

- Brønsted und Lewis Definition
- pH-Wert
- Puffer

7 Redoxreaktionen

- Oxidationszahl
- Redoxgleichung
- elektrochemische Spannungsreihe

8 Grundlagen der Anorganischen Chemie

9 Grundlagen der Organischen Chemie