20283 Allgemeine und Anorganische Chemie (AAC)

Wintersemester 2018/19

ОПЫТЪ СИСТЕМЫ ЭЛЕМЕНТОВЪ.

основанной на ихъ атомномъ вѣсѣ и химическомъ сходствѣ.

			Ti=50	Zr=90	?=180.
			V=51	Nb=94	Ta=182.
			Cr=52	Mo=96	W=186.
			Mn=55	Rh=104,4	Pt=197,4.
			Fe=56	Rn=104,4	Ir=198.
			Ni=Co=59	Pl=106,6	Os=199.
H=1			Cu=63,4	Ag=108	Hg=200.
	Be=9,4	Mg=24	Zn=65,2	Cd=112	
	B=11	Al=27,4	?=68	Ur=116	Au=197?
	C=12	Si=28	?=70	Sn=118	
	N=14	P=31	As=75	Sb=122	Bi=210?
	O=16	S=32	Se=79,4	Te=128?	
	F=19	Cl=35,5	Br=80	I=127	
Li=7	Na=23	K=39	Rb=85,4	Cs=133	Tl=204.
		Ca=40	Sr=87,6	Ba=137	Pb=207.
		?=45	Ce=92		
		?Er=56	La=94		
		?Yt=60	Di=95		
		?In=75,6	Th=118?		

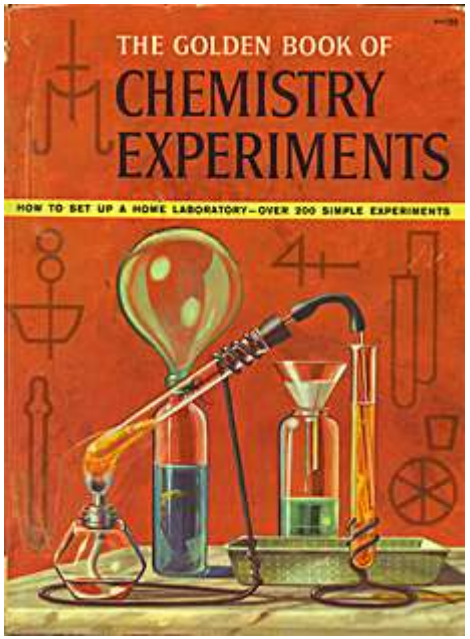
Д. Менделѣевъ

Michael J. Bojdys

m.j.bojdys.02@cantab.net
http://bojdyslab.org/
@mjbojdys

"**Chemistry** means the difference between poverty and starvation and the **abundant life**."

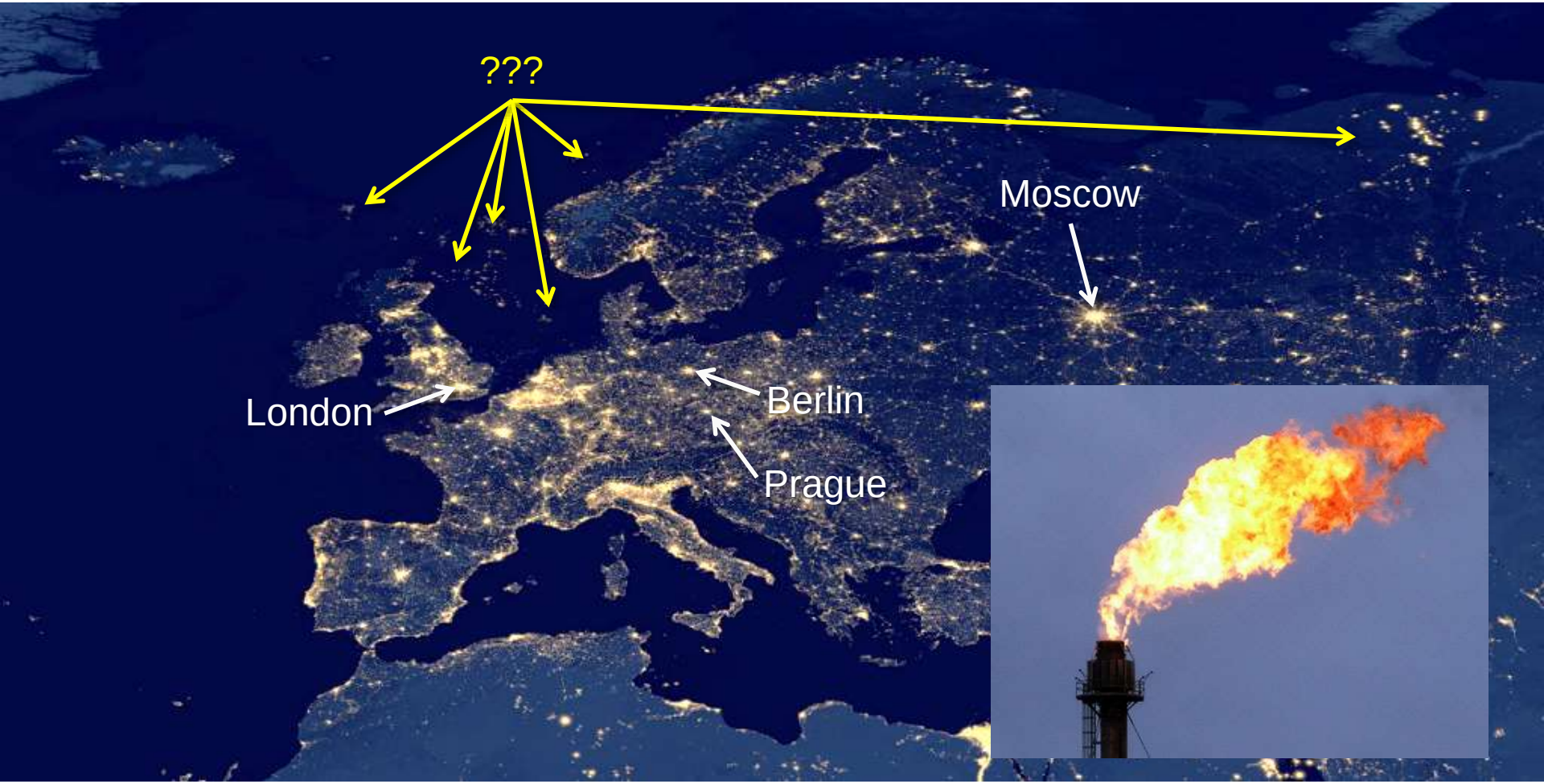
- Robert Brent



Chemie ist die Grundlage der modernen Welt

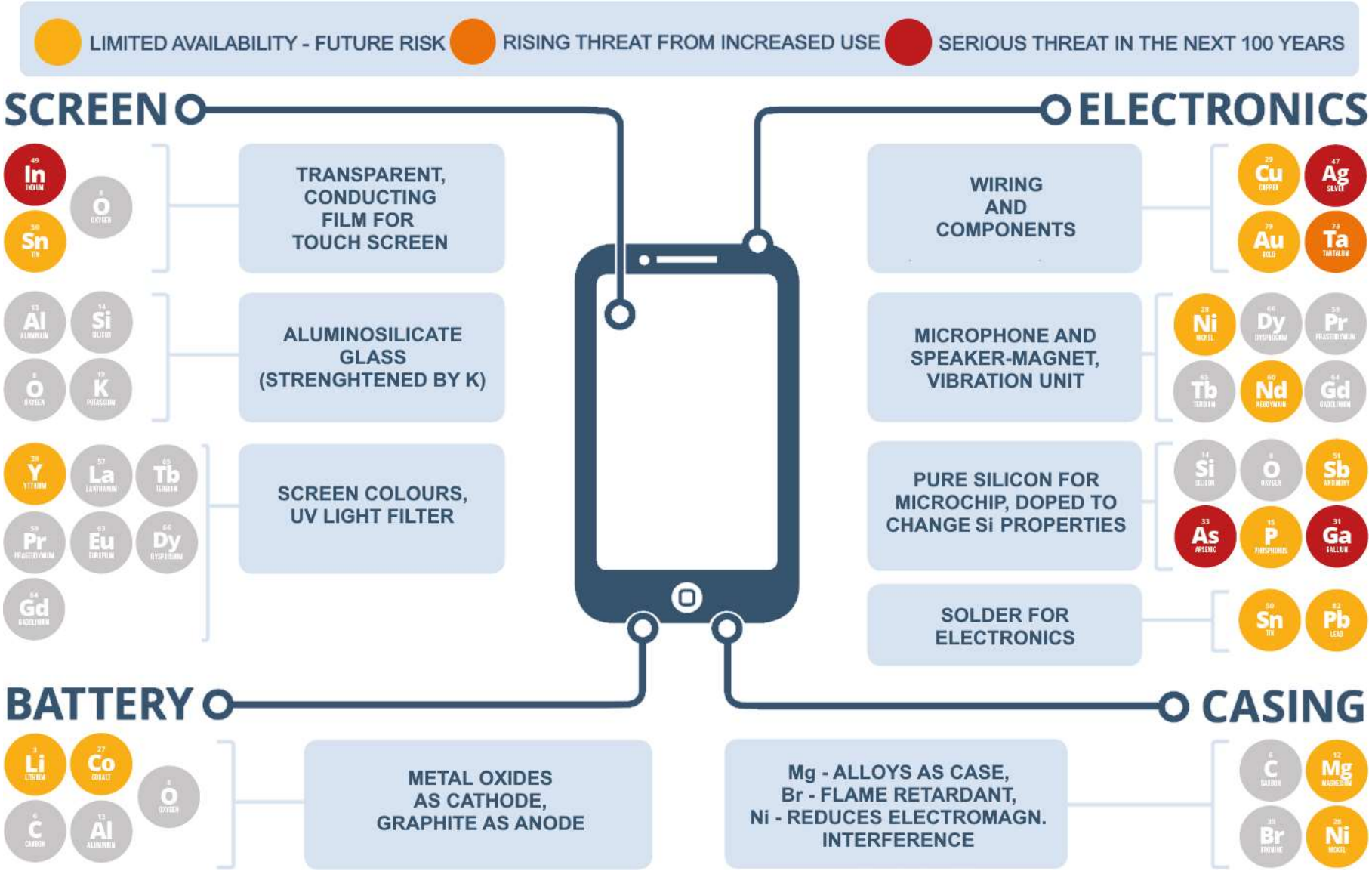
Boris Artzybasheff *Cosmos of the Union Carbide & Carbon Corp.* **1941**

CHALLENGE 1 – Energy security



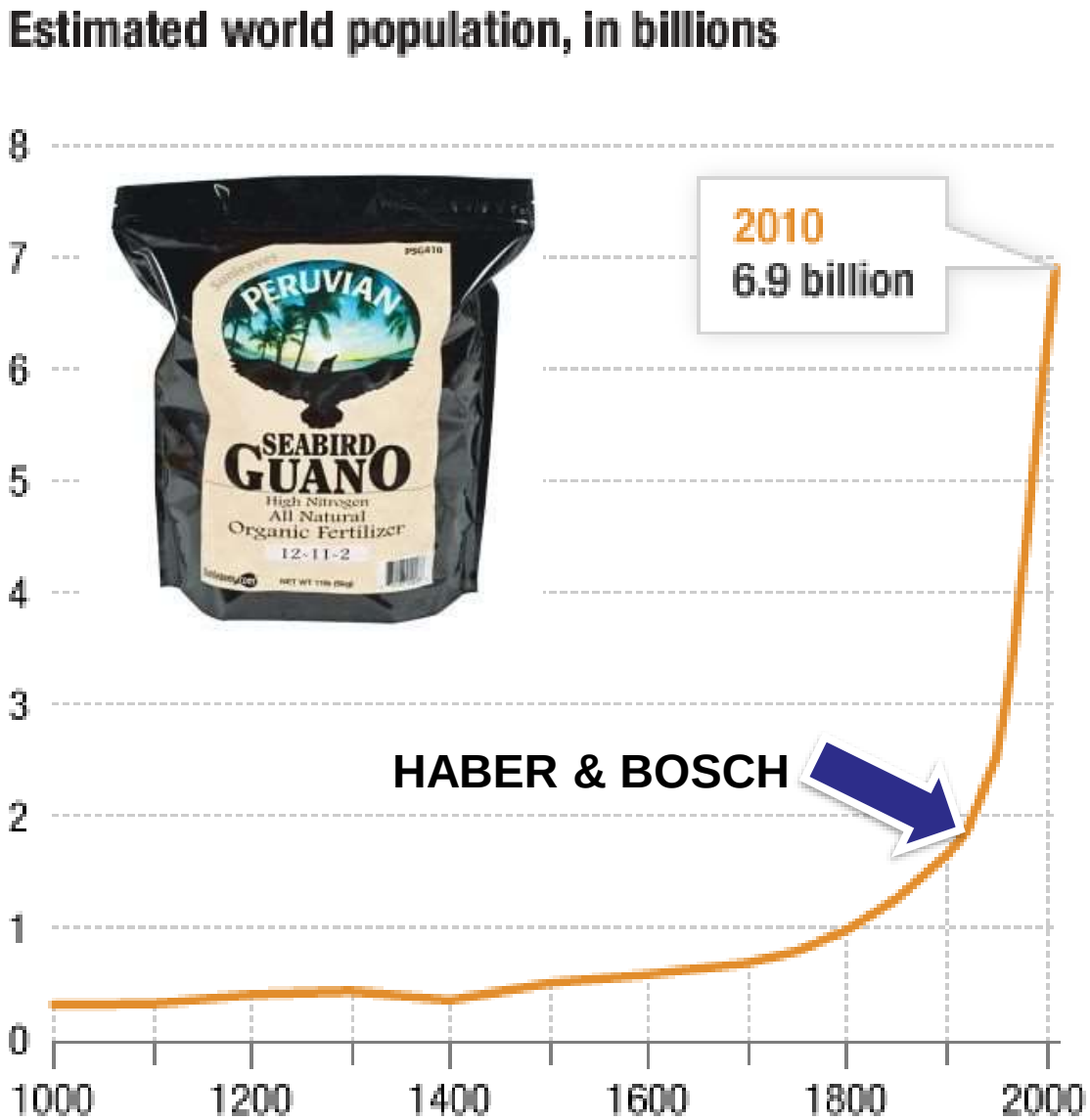
"Today we flare enough natural gas to power Germany."
- Jeff McDaniel, Velocys. Oxford Catalysts Group

CHALLENGE 2 – Endangered elements of a smartphone



Innovation Opportunities and Materials Security, Materials Knowledge Transfer Network, **2012**.

CHALLENGE 3 – Making "useful stuff"



Haber–Bosch process

$$N_2 + 3\,H_2 \rightarrow 2\,NH_3$$

$$(\Delta H° = -91.8\ \text{kJ})$$

CHALLENGE 4 – Making “new stuff”

ars TECHNICA SIGN IN

SCIENTIFIC METHOD —

Designer 2D material may take us beyond graphene’s limits

A decade of work reveals chemically inert 2D semiconductor with decent bandgap.

CHRIS LEE - 6/5/2014, 9:47 PM

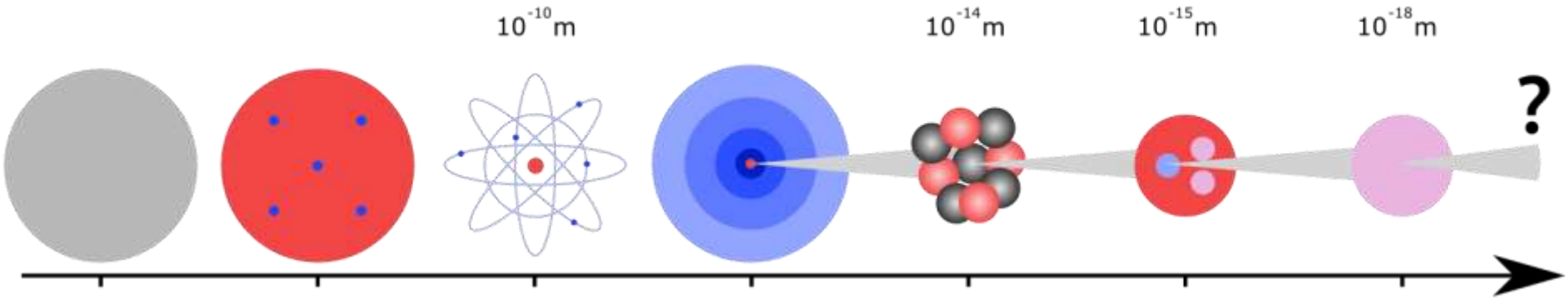
Twentieth Century Fox

Creating something new is exhilarating.

https://arstechnica.com/science/2014/06/designer-2d-material-may-take-us-beyond-graphenes-limits/

Bei Adam und Eva…

Atommodell(e)



1808 J.Dalton:
Atom als homogene Massenkugel

1898 J. J. Thomson:
Rosinenkuchenmodell

1903 E. Rutherford:
Kern-Hülle-Struktur

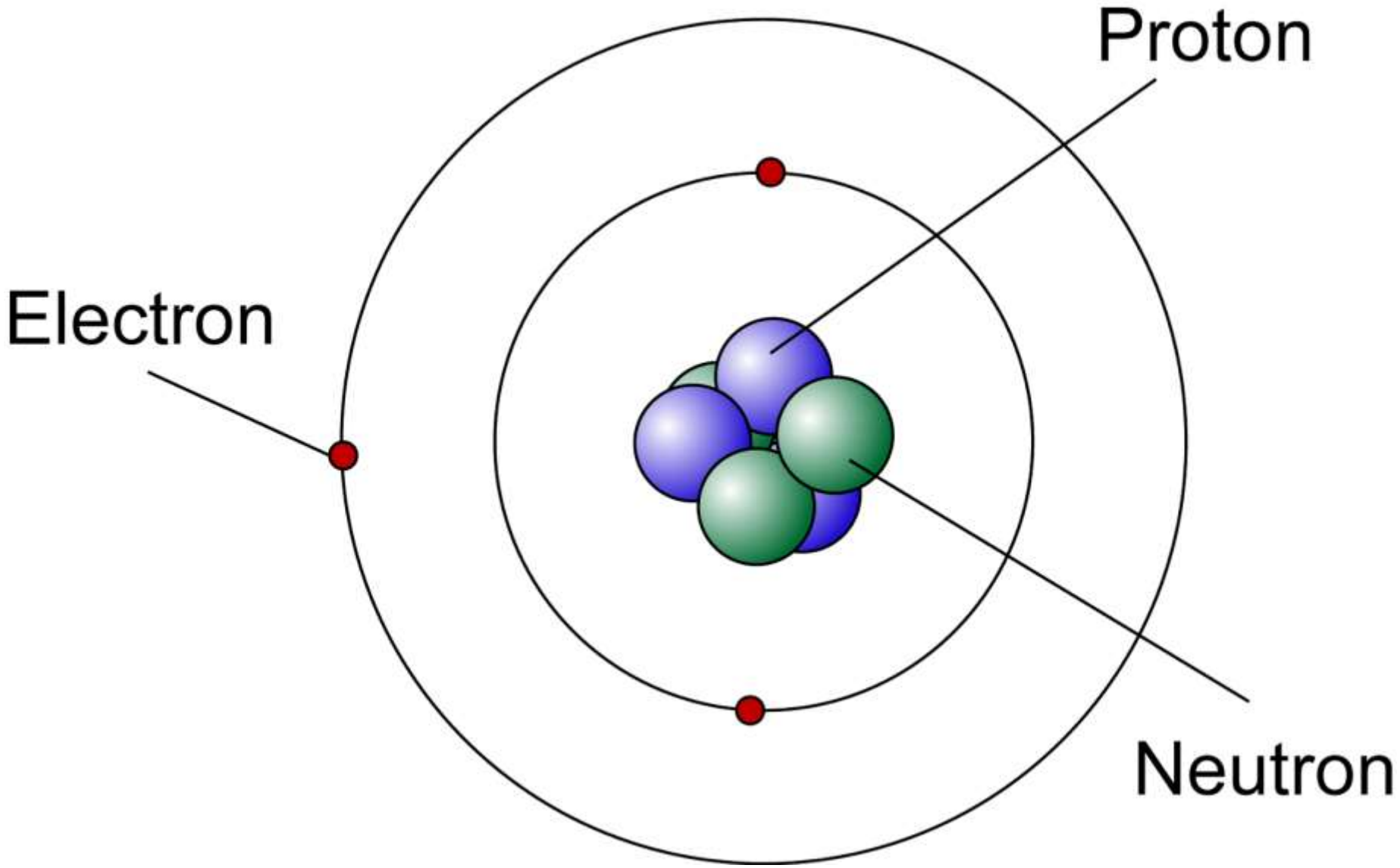
1927 W. Heisenberg:
Orbitale

1920 E. Rutherford:
Kern besteht aus Protonen und Neutronen

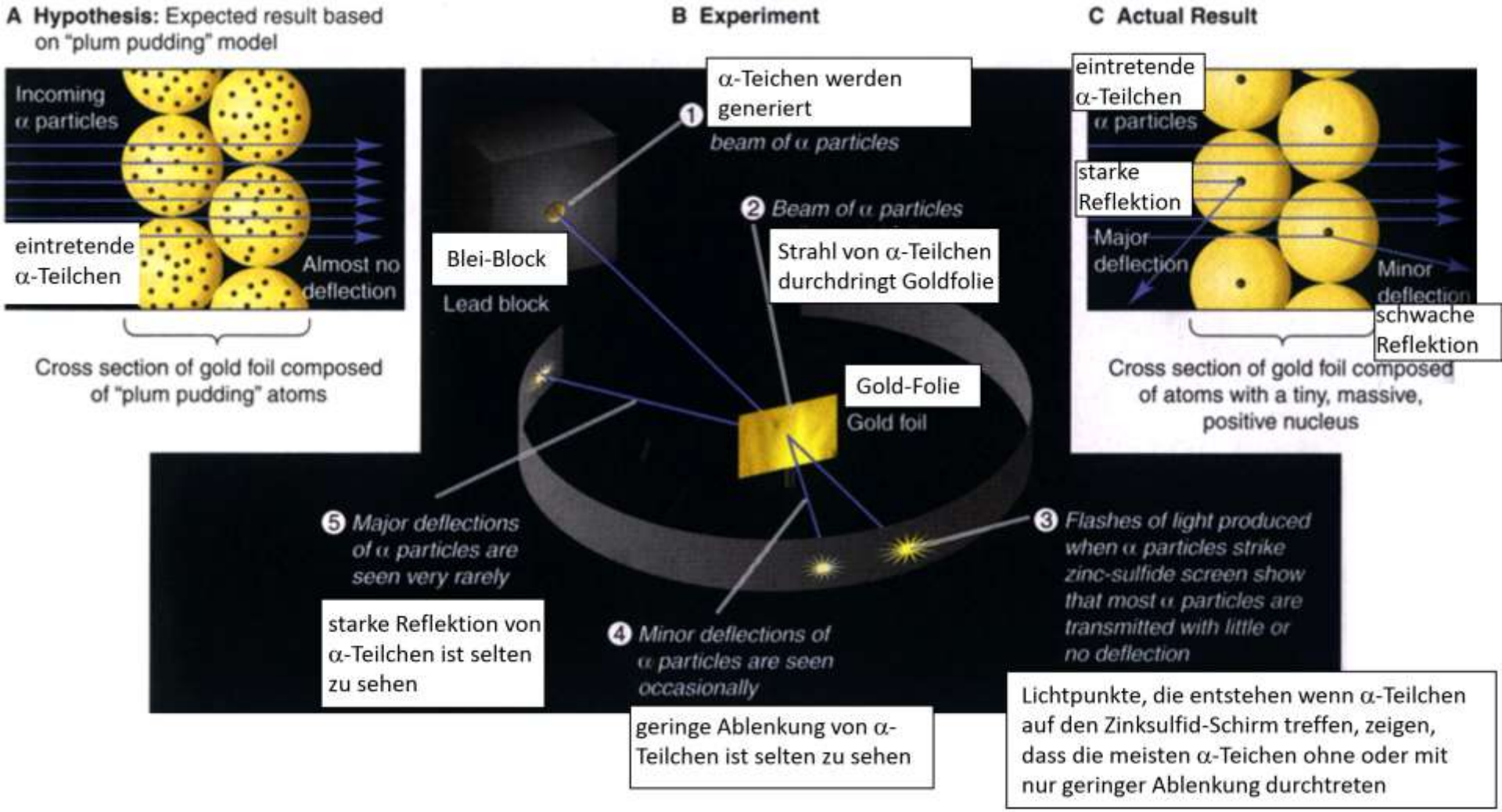
1964 M. Gell-Mann:
Nukleonen bestehen aus Quarks

Aus was bestehen Quarks?

Das Atommodell (?)



Ruhterford Experiment



Das Atommodell

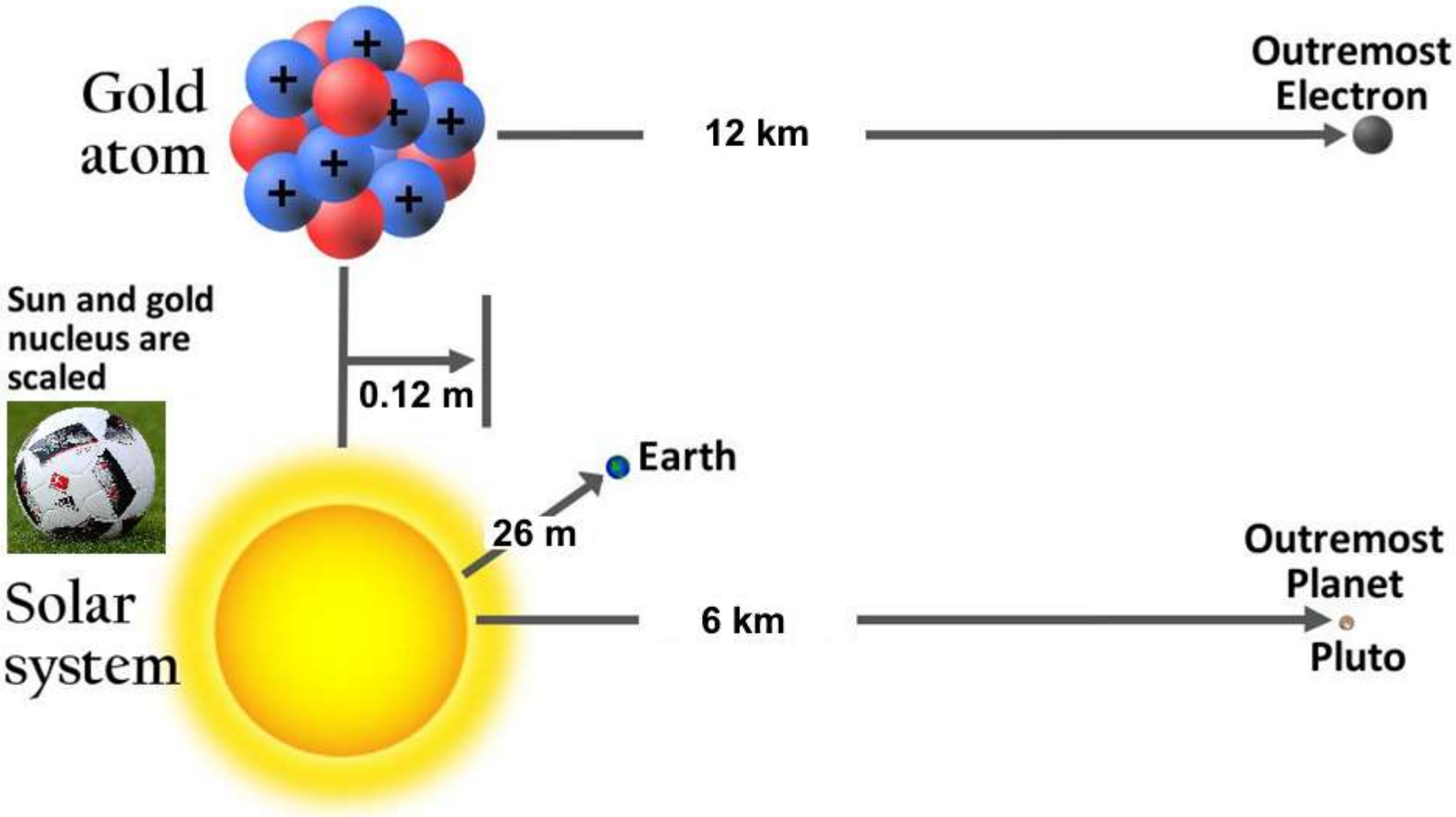
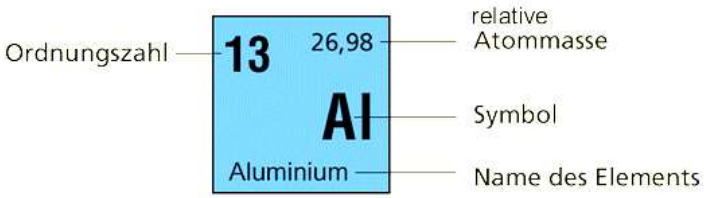


Tabelle 1.2 Nuklide der ersten zehn Elemente

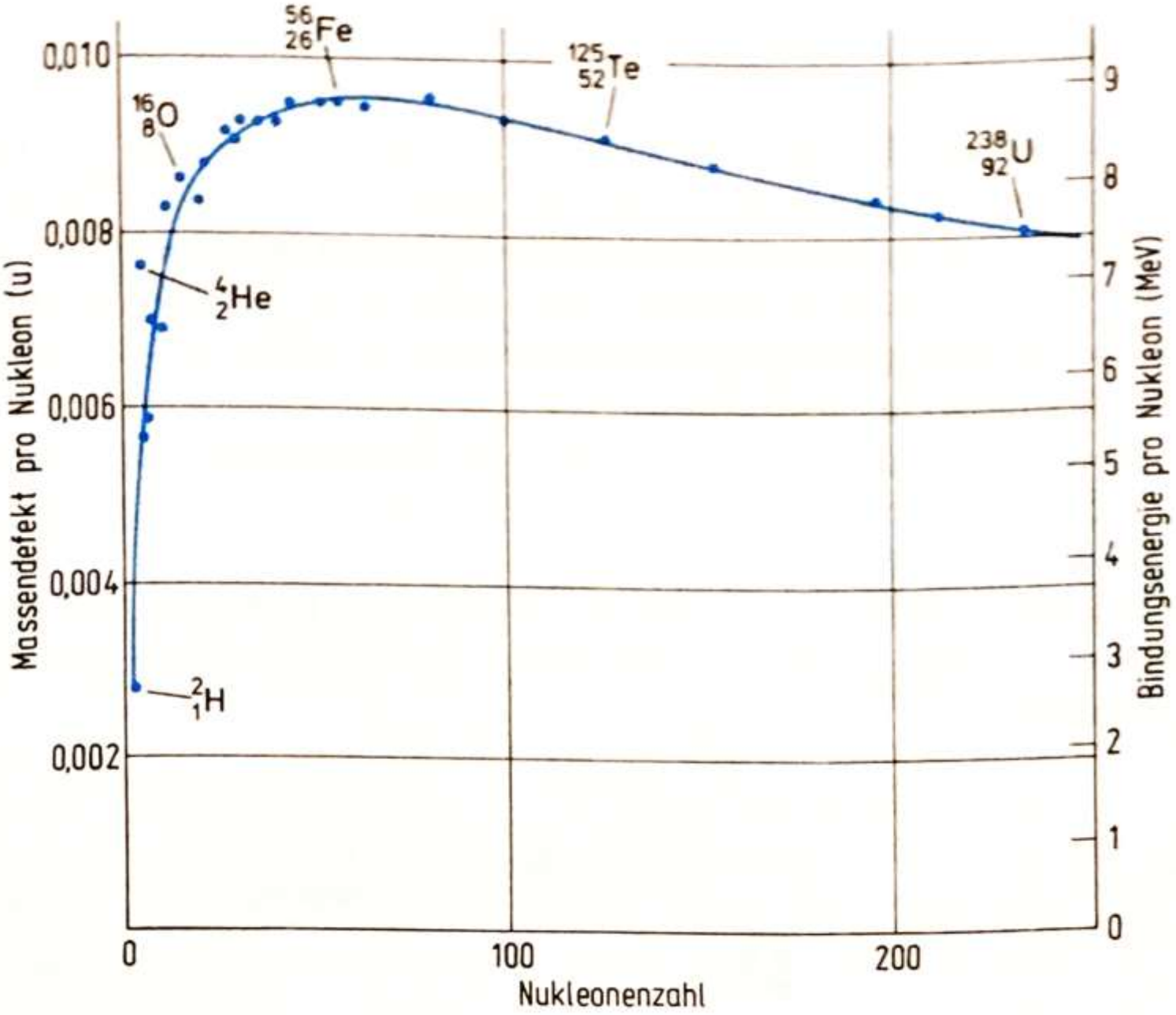
Ordnungszahl = Kernladungszahl	Element	Nuklidsymbol	Protonen- bzw. Elektronenzahl	Neutronenzahl	Nukleonenzahl	Nuklidmasse in u	Atomzahlanteil (Isotopenhäufigkeit) in %	Mittlere Atommasse in u
1	Wasserstoff	^{1}H	1	0	1	1,007825	99,985	1,00794
	H	^{2}H	1	1	2	2,01410	0,015	
		^{3}H	1	2	3		Spuren	
2	Helium	^{3}He	2	1	3	3,01603	0,00013	4,00260
	He	^{4}He	2	2	4	4,00260	99,99987	
3	Lithium	^{6}Li	3	3	6	6,01512	7,42	6,941
	Li	^{7}Li	3	4	7	7,01600	92,58	
4	Beryllium	^{9}Be	4	5	9	9,01218	100,0	9,01218
	Be							
5	Bor	^{10}B	5	5	10	10,01294	19,78	10,811
	B	^{11}B	5	6	11	11,00931	80,22	
6	Kohlenstoff	^{12}C	6	6	12	12	98,89	12,011
	C	^{13}C	6	7	13	13,00335	1,11	
		^{14}C	6	8	14		Spuren	
7	Stickstoff	^{14}N	7	7	14	14,00307	99,63	14,00674
	N	^{15}N	7	8	15	15,00011	0,36	
8	Sauerstoff	^{16}O	8	8	16	15,99491	99,759	15,9994
	O	^{17}O	8	9	17	16,99913	0,037	
		^{18}O	8	10	18	17,99916	0,204	
9	Fluor	^{19}F	9	10	19	18,99840	100	18,99840
	F							
10	Neon	^{20}Ne	10	10	20	19,99244	90,92	20,1797
	Ne	^{21}Ne	10	11	21	20,99395	0,26	
		^{22}Ne	10	12	22	21,99138	8,82	

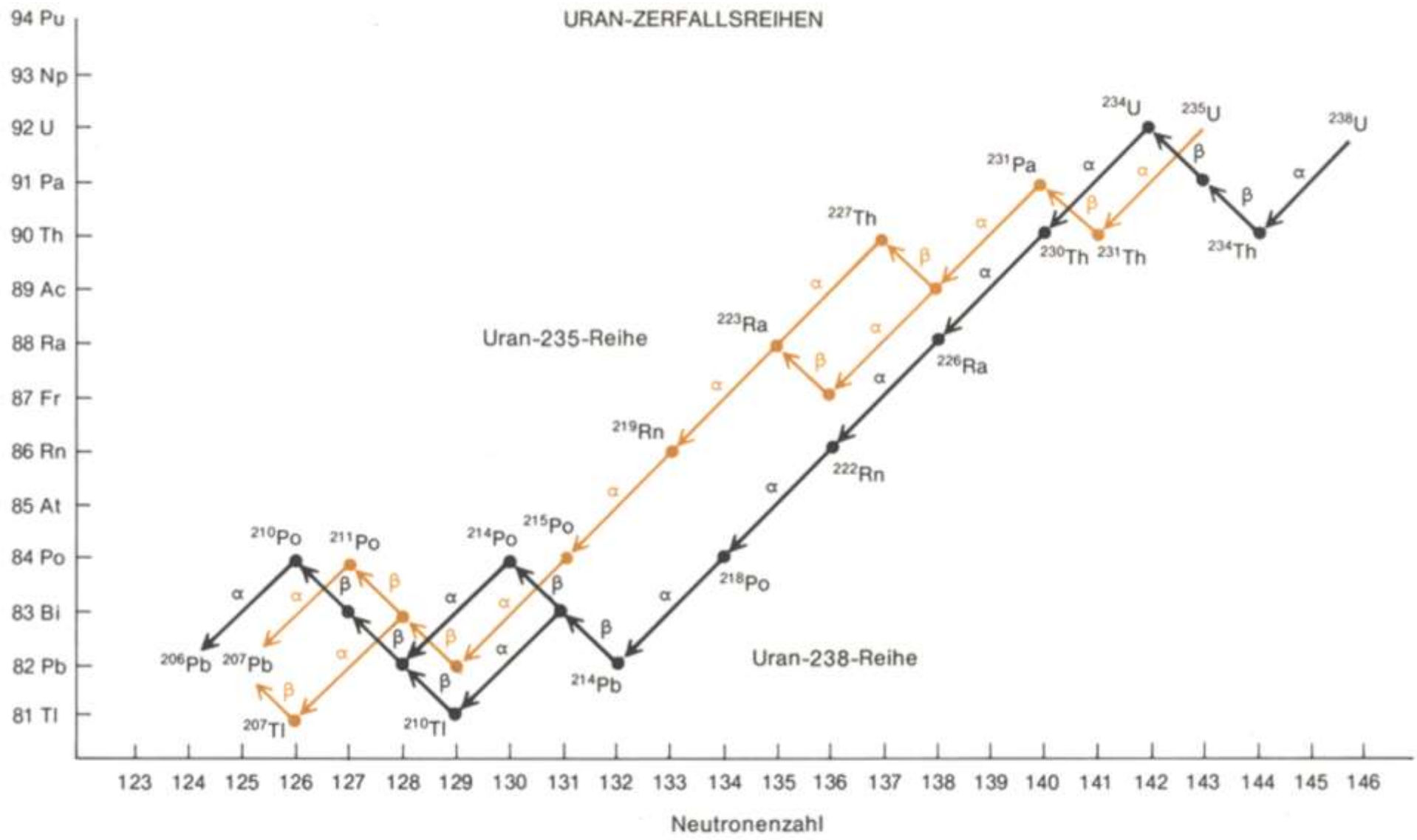
Der Zahlenwert der mittleren Atommasse in u ist gleich der relativen Atommasse A_r.

Im PSE:



Kernbindungsenergie


$^{56}_{26}Fe$
$^{125}_{52}Te$
$^{16}_{8}O$
$^{238}_{92}U$
$^{4}_{2}He$
$^{2}_{1}H$
0,010
0,008
0,006
0,004
0,002
Massendefekt pro Nukleon (u)
9
8
7
6
5
4
3
2
1
0
Bindungsenergie pro Nukleon (MeV)
0
100
200
Nukleonenzahl

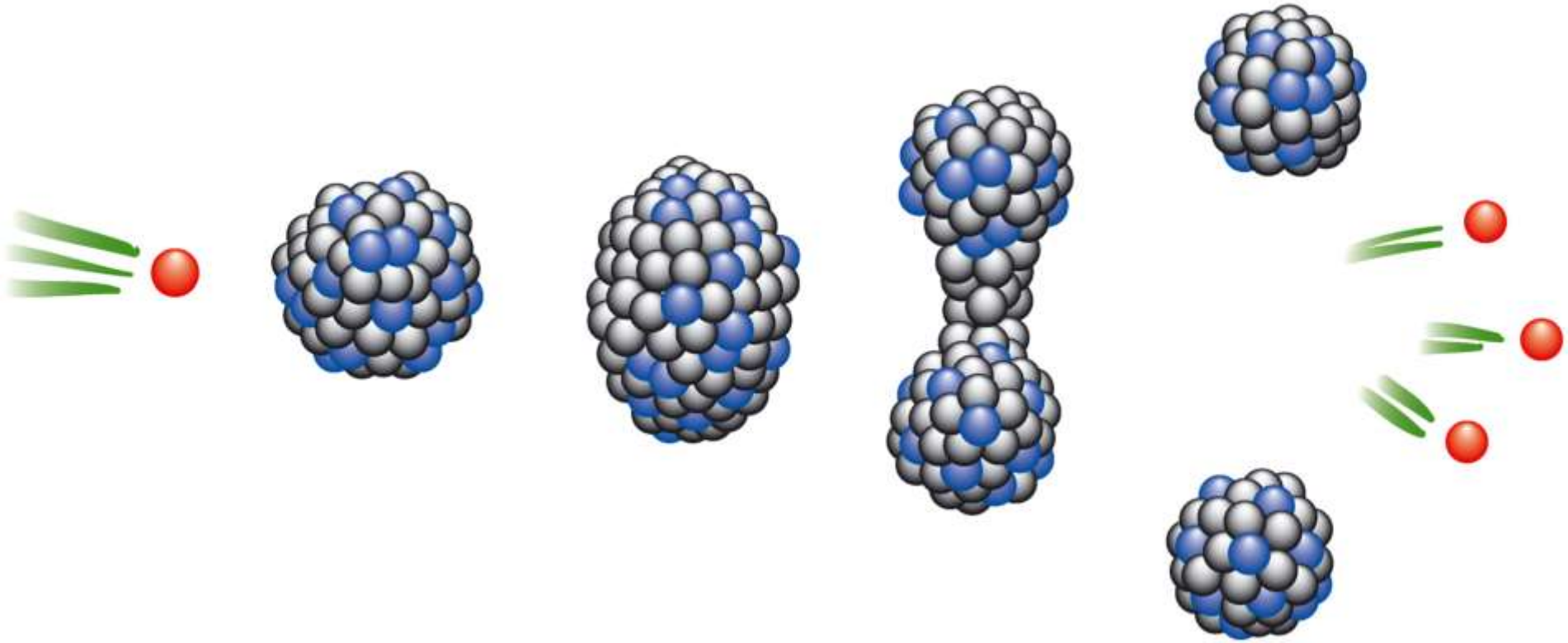


Uran-235 und Uran-238 zerfallen beide in einer Folge von α- und β-Emissionen letztlich zu stabilen Isotopen des Bleis. Ähnliche vielstufige Zerfallsketten gibt es von Thorium-232 und Plutonium-241.

Tabelle 1.4 Uran-Radium-Zerfallsreihe

Nuklid	Halbwertszeit $t_{1/2}$	Nuklid	Halbwertszeit $t_{1/2}$	Nuklid	Halbwertszeit $t_{1/2}$
$^{238}_{92}U$	$4{,}51 \cdot 10^9$ Jahre	$^{226}_{88}Ra$	1600 Jahre	$^{214}_{84}Po$	$1{,}64 \cdot 10^{-4}$ Sekunden
$^{234}_{90}Th$	24,1 Tage	$^{222}_{86}Rn$	3,83 Tage	$^{210}_{82}Pb$	21 Jahre
$^{234}_{91}Pa$	1,17 Minuten	$^{218}_{84}Po$	3,05 Minuten	$^{210}_{83}Bi$	5,01 Tage
$^{234}_{92}U$	$2{,}47 \cdot 10^5$ Jahre	$^{214}_{82}Pb$	26,8 Minuten	$^{210}_{84}Po$	138,4 Tage
$^{230}_{90}Th$	$8{,}0 \cdot 10^4$ Jahre	$^{214}_{83}Bi$	19,7 Minuten	$^{206}_{82}Pb$	stabil

Das Prinzip der Kernspaltung



Schematische Darstellung des Zusammenstosses eines thermischen Neutrons und eines schweren Nuklids, unter Aufspaltung in zwei Nuklide niedrigerer Massenzahl und gleichzeitiger Freisetzung von (in diesem Fall) drei Neutronen. Die Kernspaltung geht einher mit der Freisetzung großer Mengen Energie.

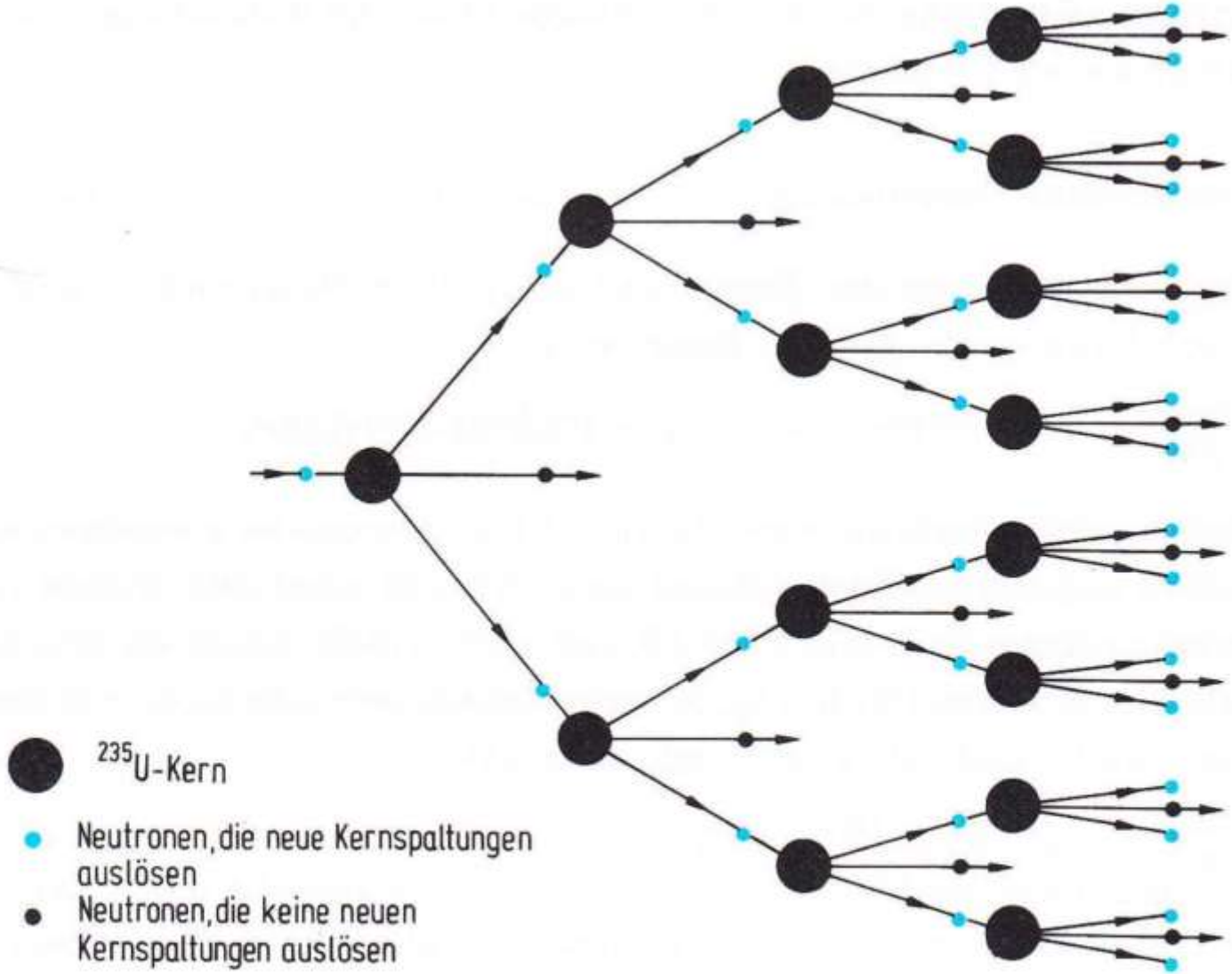


Abbildung 1.10 Schema der ungesteuerten Kettenreaktion. Bei jeder ^{235}U-Kernspaltung entstehen durchschnittlich drei Neutronen. Davon lösen im Mittel zwei Neutronen neue Kernspaltungen aus ($k = 2$). Die Zahl der Spaltungen wächst dadurch lawinenartig an.

Das PSE

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb		
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No		

d-block

f-block

Four elements, officially added to the periodic table in December 2015, have been named. They are nihonium (Nh), moscovium (Mc), tennessine (Ts), and oganesson (Og).

Beispiele von Spektren

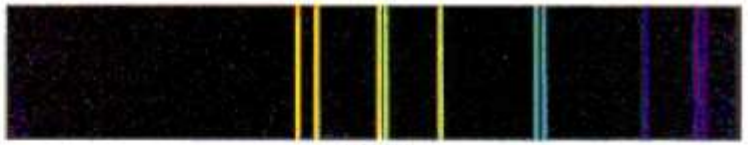
- Sonne

THE SOLAR SPECTRUM

- Natrium (Na)

SODIUM

- Quecksilber (Hg)


MERCURY

- Litium (Li)

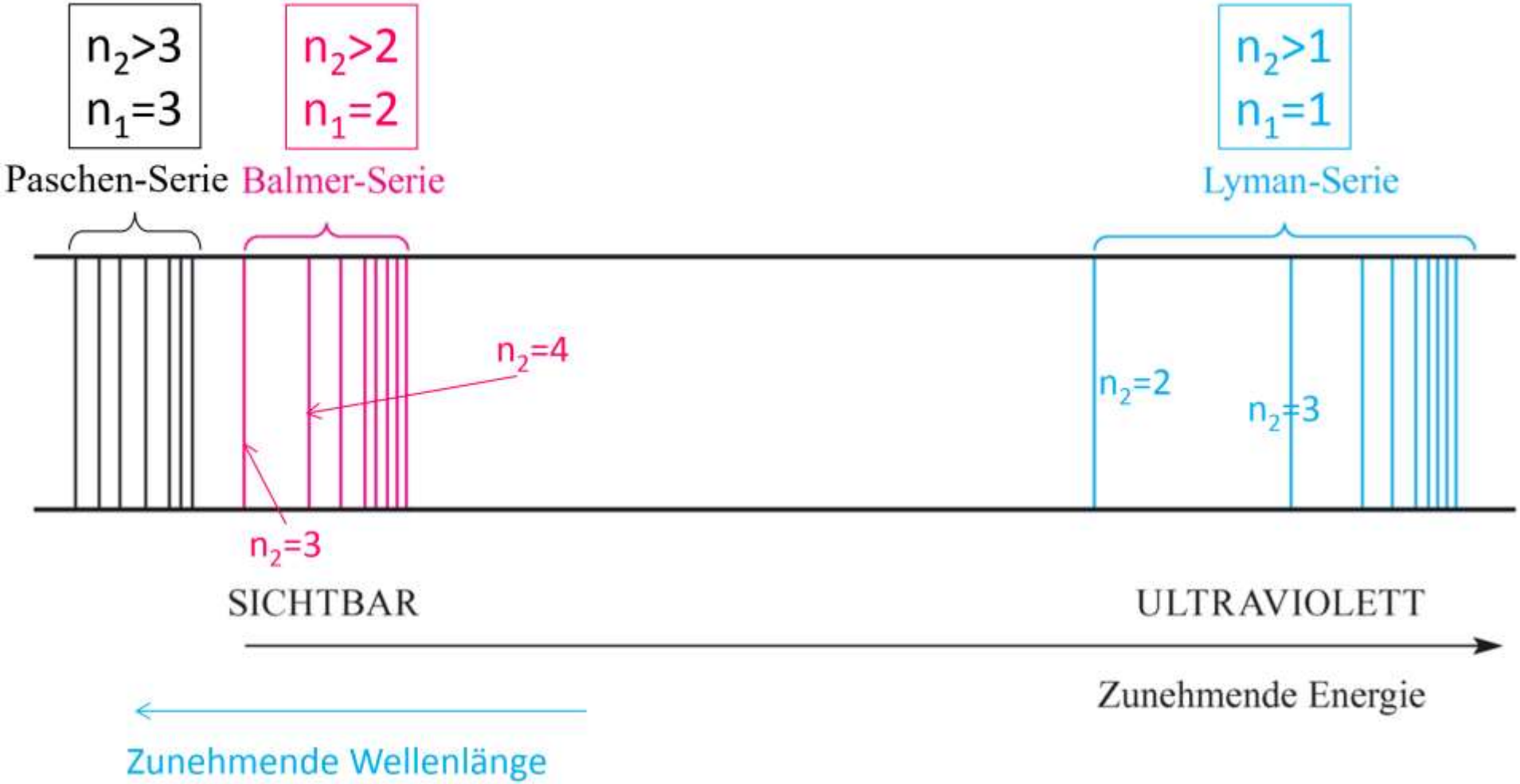
LITHIUM

- Wasserstoff (H)

HYDROGEN

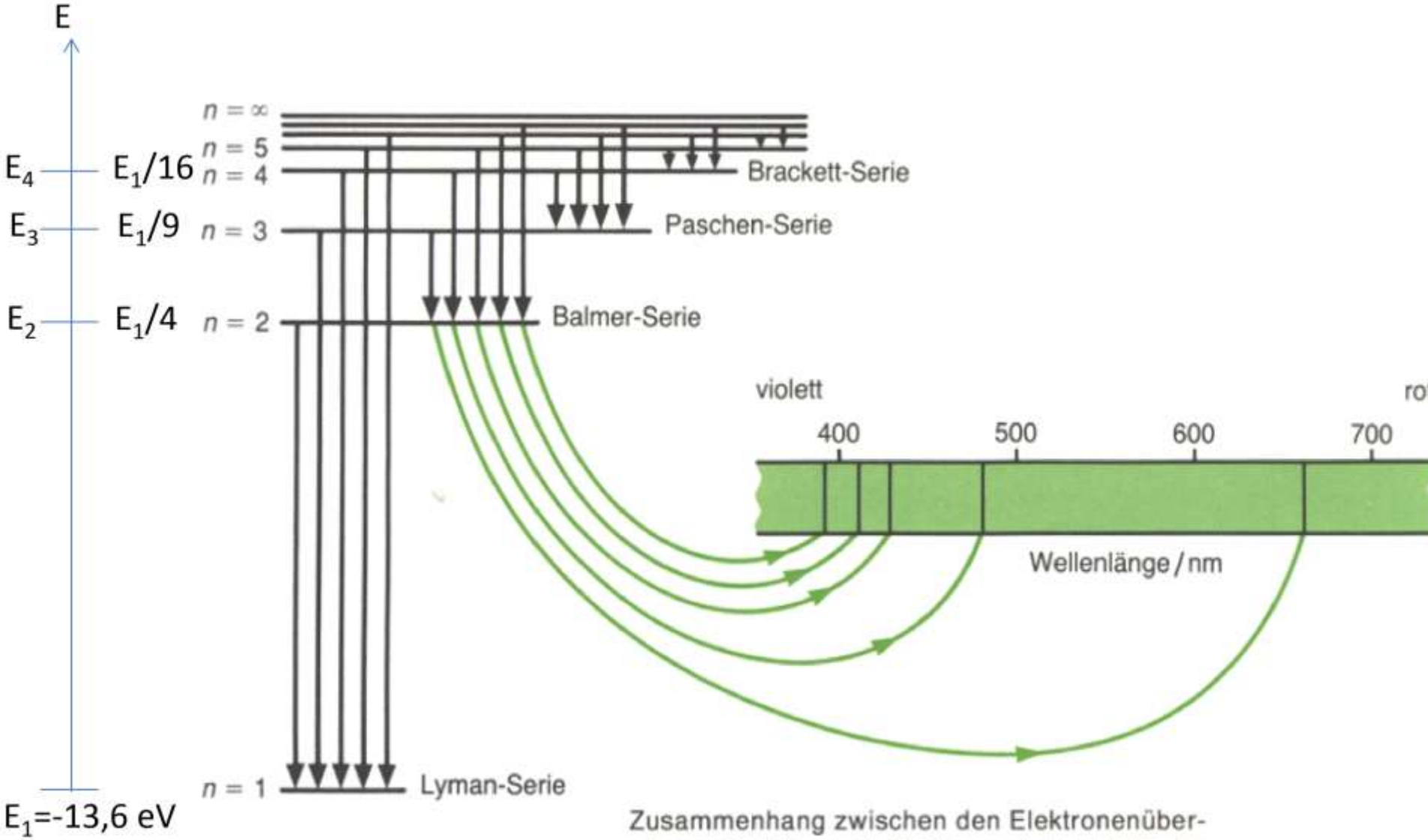
Frage: Wie können solche Linienspektren erklärt werden?

Beispiele von Spektren



Ausschnitt aus dem Emissionsspektrum des atomaren Wasserstoffs. Verschiedene Gruppierungen von Linien besitzen Namen, z. B. Balmer- und Lyman-Serie.

Linienspektren und Bohr´sches Atommodell



Zusammenhang zwischen den Elektronenübergängen im Wasserstoff-Atom und den Linien im Spektrum

Wasserstoff im Grundzustand

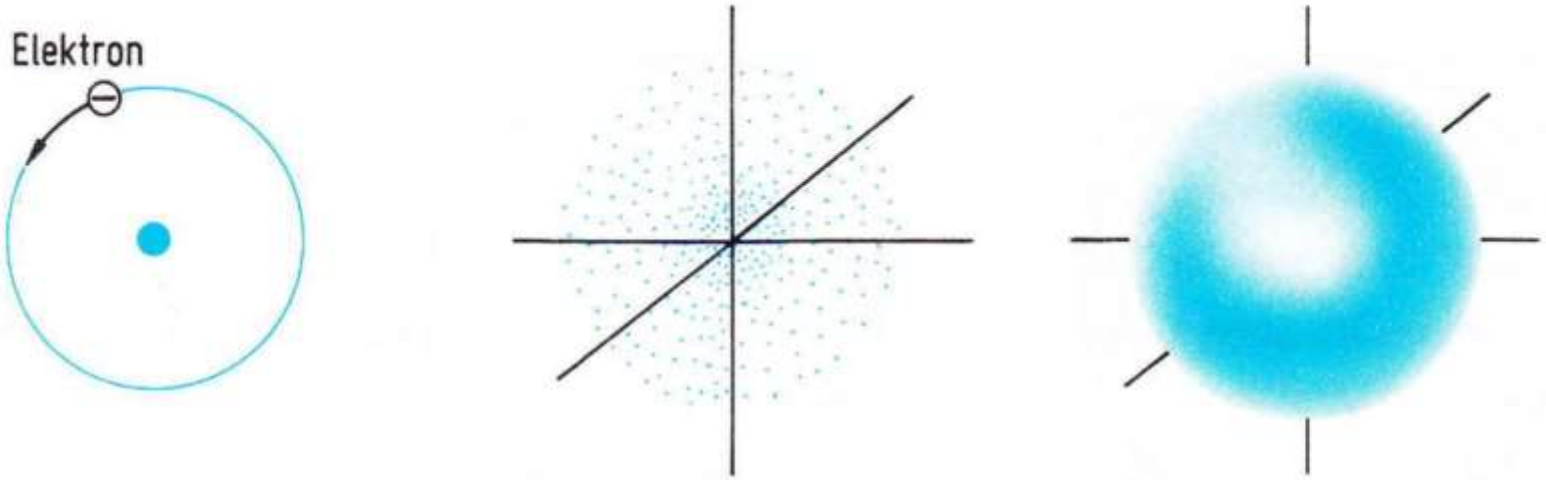


Abbildung 1.22 Verschiedene Darstellungen des Elektrons eines Wasserstoffatoms im Grundzustand.

Elektronenwellen

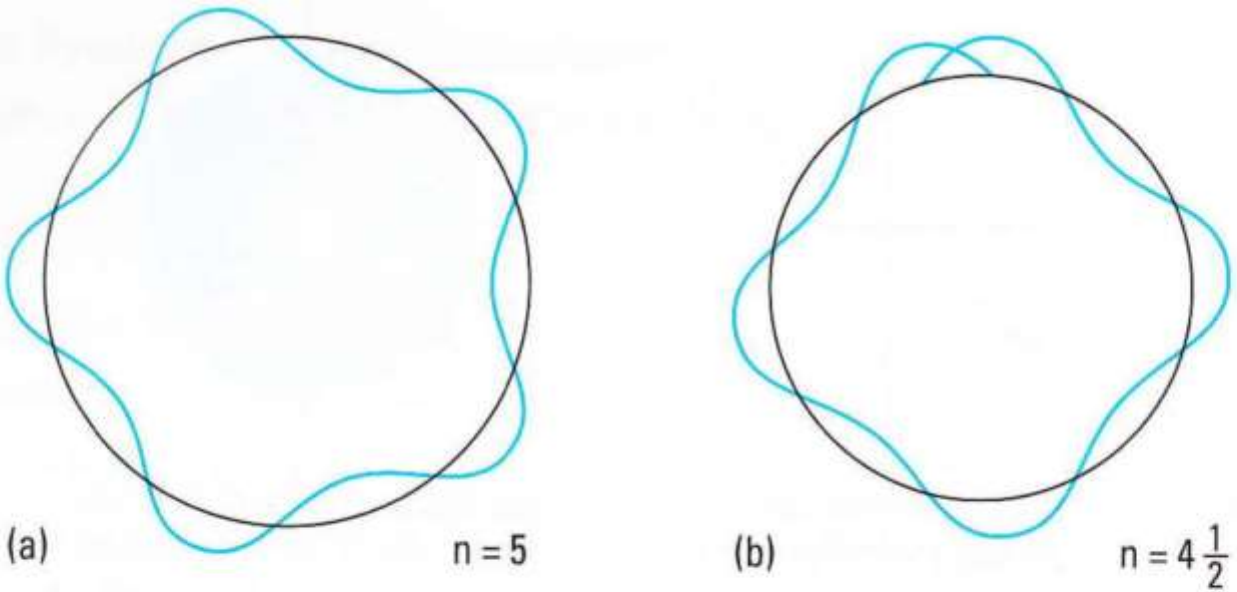


Abbildung 1.23 a) Eindimensionale stehende Elektronenwelle auf einer Bohr'schen Bahn. Die Bedingung für eine stehende Welle ist $n\lambda = 2r\pi$ ($n = 1,2,3 \ldots$).
b) Die Bedingung für eine stehende Welle ist nicht erfüllt.

Die Quantenzahlen

Die Wellenfunktionen eines Elektrons in Abhängigkeit von den Raumkoordinaten (x, y, z) nennt man auch **Orbitale.** Die Orbitale beschreiben den Raum, in dem sich ein Elektron mit einer 90%igen Wahrscheinlichkeit aufhält.

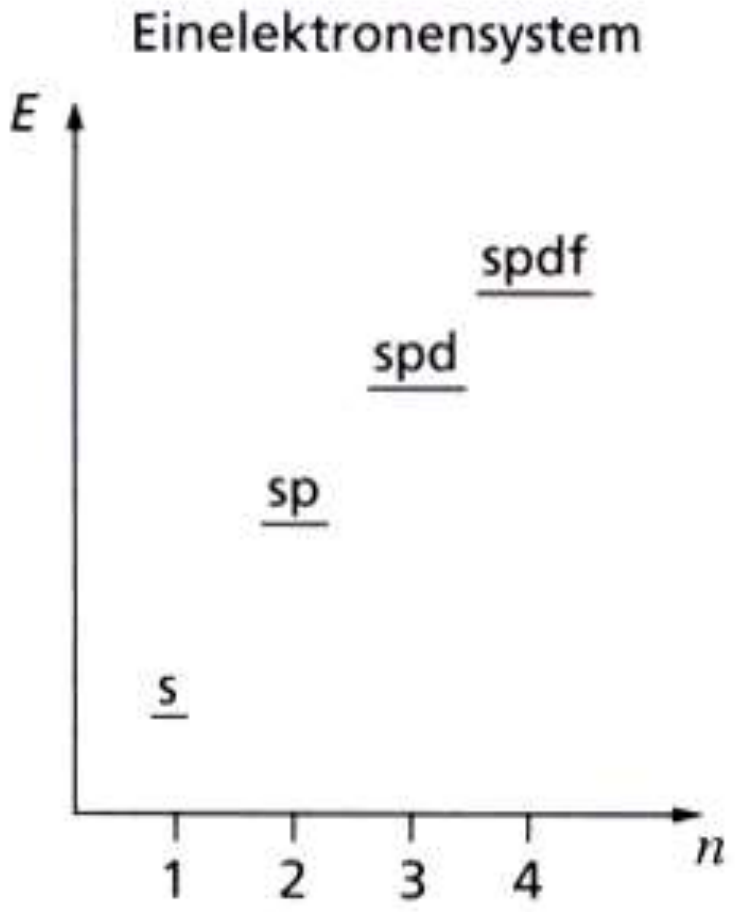
Quantenzahl	Werte	Bedeutung
Hauptquantenzahl	$n = 1, 2, 3, 4 \ldots$	Sie bestimmt die Größe des Orbitals und ist entscheidend für die Orbitalenergie. Je größer n ist, desto größer ist der Raum, dem ein Elektron zur Verfügung steht und desto geringer ist die Elektronendichte Ψ^2.
Nebenquantenzahl	$l = 0, 1, 2, 3 \ldots$ $l \leq (n - 1)$	Diese Quantenzahl sagt etwas über die Gestalt des Orbitales aus. Orbitale können beispielsweise kugelförmig (s-Orbitale) oder hantelförmig (p-Orbitale) sein.
Magnetquantenzahl	$m = -l \ldots -1, 0, 1 \ldots l$ $-l \leq m \leq l$	Sie bestimmt die Orientierung des Orbitals im Raum. So liegen die drei 2p-Orbitale, die mit p_x, p_y und p_z bezeichnet werden, genau auf den entsprechenden Achsen des kartesischen Raumkoordinatensystems.
Spinquantenzahl	$s = +½$ oder $s = -½$	Elektronen verfügen über die Eigenschaft des Spins, der nur die Werte $-½$ oder $+½$ annehmen kann.

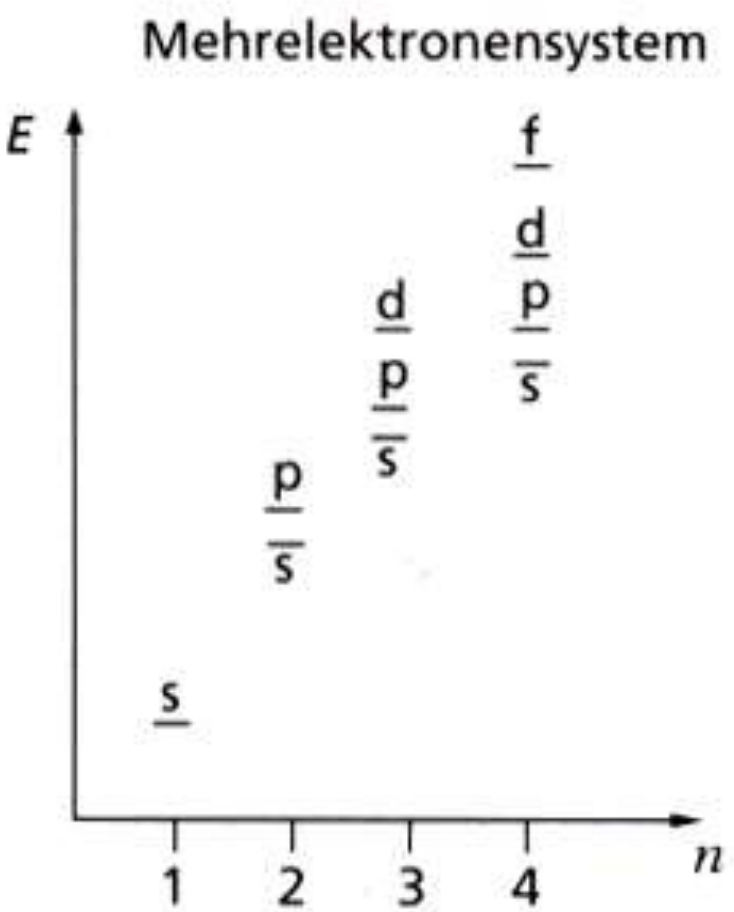
Quantenzusände im Wasserstoffatom (bis n = 4)

Schale	n	l	Orbitaltyp	m_l	Anzahl der Orbitale	m_s	Anzahl der Quantenzustände	
K	1	0	1s	0	1	$\pm 1/2$	2	2
L	2	0	2s	0	1	$\pm 1/2$	2	8
		1	2p	−1 0 +1	3	$\pm 1/2$	6	
M	3	0	3s	0	1	$\pm 1/2$	2	18
		1	3p	−1 0 +1	3	$\pm 1/2$	6	
		2	3d	−2 −1 0 +1 +2	5	$\pm 1/2$	10	
N	4	0	4s	0	1	$\pm 1/2$	2	32
		1	4p	−1 0 +1	3	$\pm 1/2$	6	
		2	4d	−2 −1 0 +1 +2	5	$\pm 1/2$	10	
		3	4f	−3 −2 −1 0 +1 +2 +3	7	$\pm 1/2$	14	

Quantenzahlen und Energie der Orbitale

Aufspaltung der Energieniveaus im Mehrelektronensystem

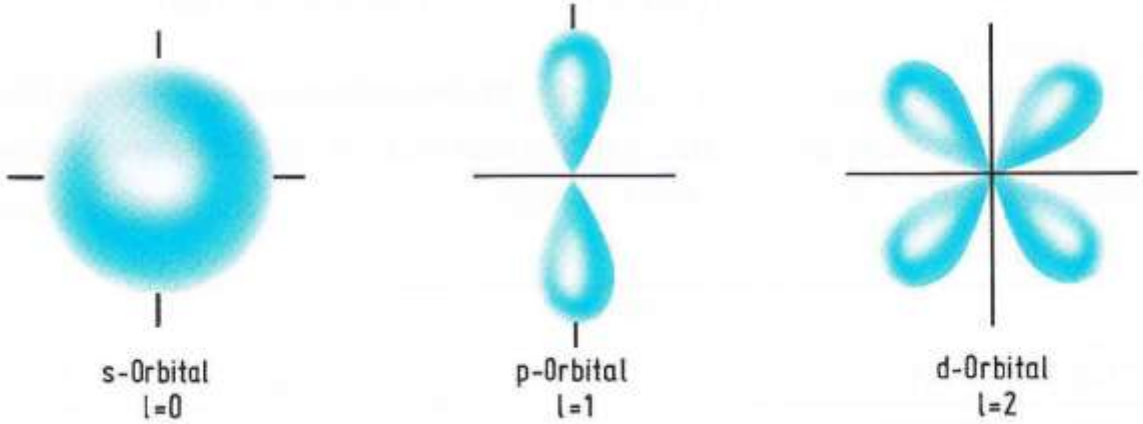




Quantenzahlen und Orbitale

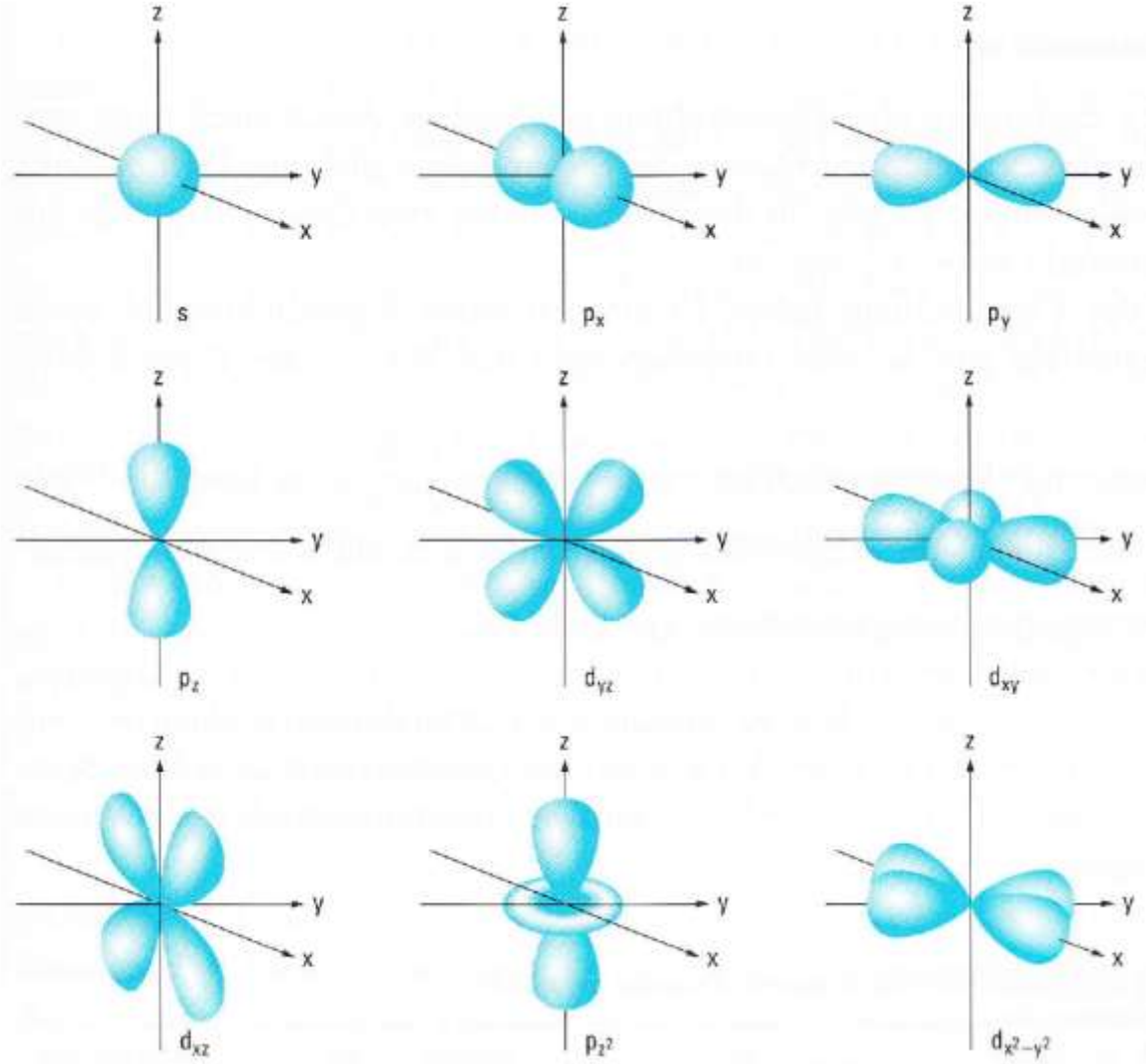
n – Größe des Orbitals

l – Gestalt der Orbitale



Quantenzahlen und Orbitale

m – Orientierung der Orbitale im Raum



Die Schrödinger-Gleichung

$$\Psi_{n,l,m} = [N] \cdot [R_{n,l}(r)] \cdot [\chi_{l,m}(\theta,\varphi)]$$

Tabelle 1.6 Einige Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms
(Die Winkelfunktionen sind in Polarkoordinaten und kartesischen Koordinaten angegeben.)

Quantenzahlen n	l	m_l	Orbital	Eigenwert E_n	Normierte Radialfunktion $R_{n,l}(r)$	Normierte Winkelfunktion $\chi_{l,m_l}(\vartheta,\varphi)$	$\chi_{l,m_l}\left(\frac{x}{r},\frac{y}{r},\frac{z}{r}\right)$
1	0	0	1s	E_1	$\frac{2}{\sqrt{a_0^3}}\,e^{-\frac{r}{a_0}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2	0	0	2s	$E_2=\frac{E_1}{4}$	$\frac{1}{2\sqrt{2a_0^3}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2	1	1	$2p_x$	$E_2=\frac{E_1}{4}$	$\frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}}\,\frac{r}{a_0}\,e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\sin\vartheta\cos\varphi$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\,\frac{x}{r}$
2	1	0	$2p_z$	$E_2=\frac{E_1}{4}$	$\frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}}\,\frac{r}{a_0}\,e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cos\vartheta$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\,\frac{z}{r}$
2	1	−1	$2p_y$	$E_2=\frac{E_1}{4}$	$\frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}}\,\frac{r}{a_0}\,e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\sin\vartheta\sin\varphi$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\,\frac{y}{r}$

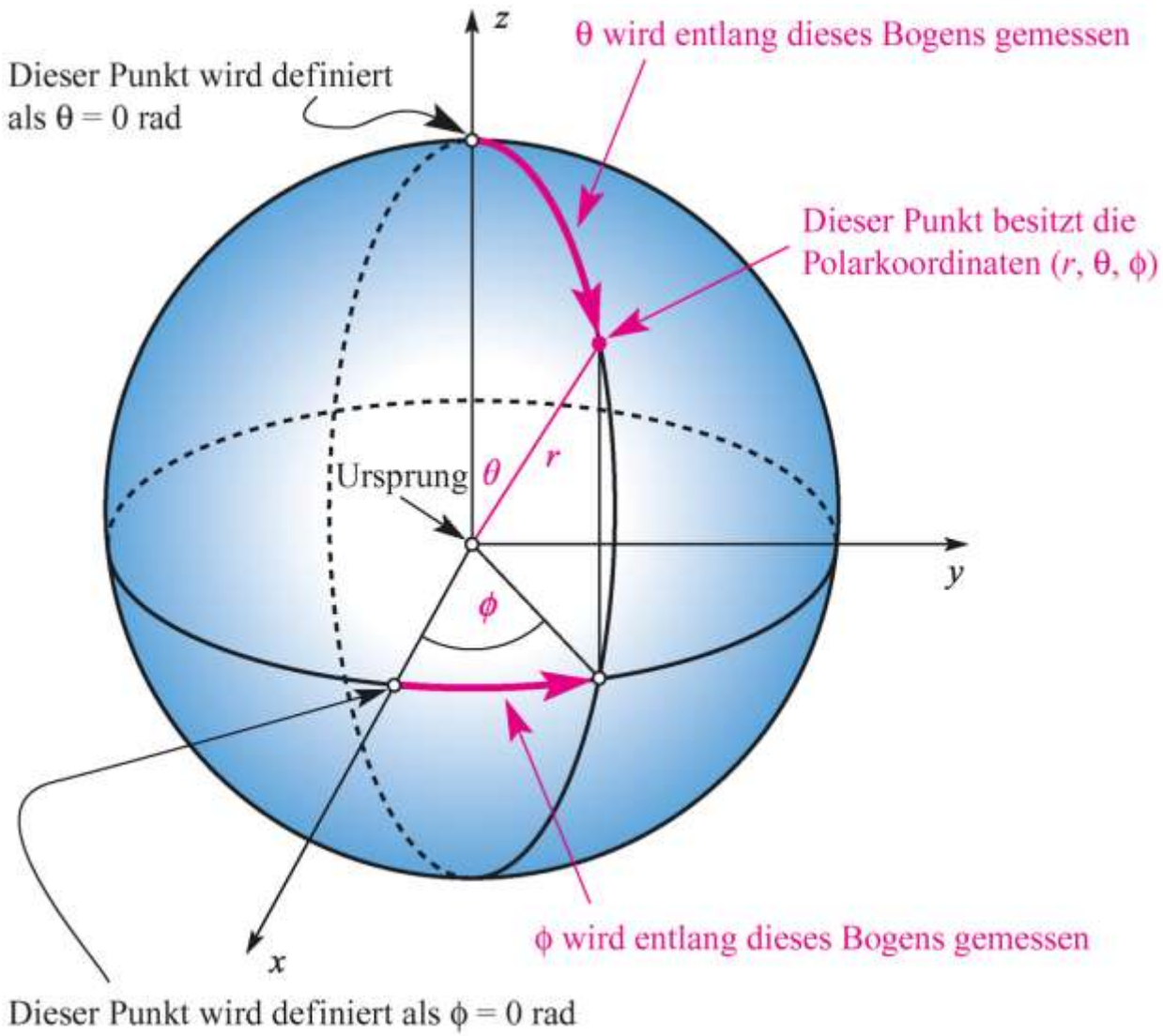
a_0 ist der Bohr-Radius (vgl. Gl. 1.17). Er beträgt $a_0 = \frac{h^2\varepsilon_0}{\pi m e^2}$

Konstante Winkelfunktion (kugelsymmetrich)

Winkelabhängiges χ
Gleiche Radialfunktion

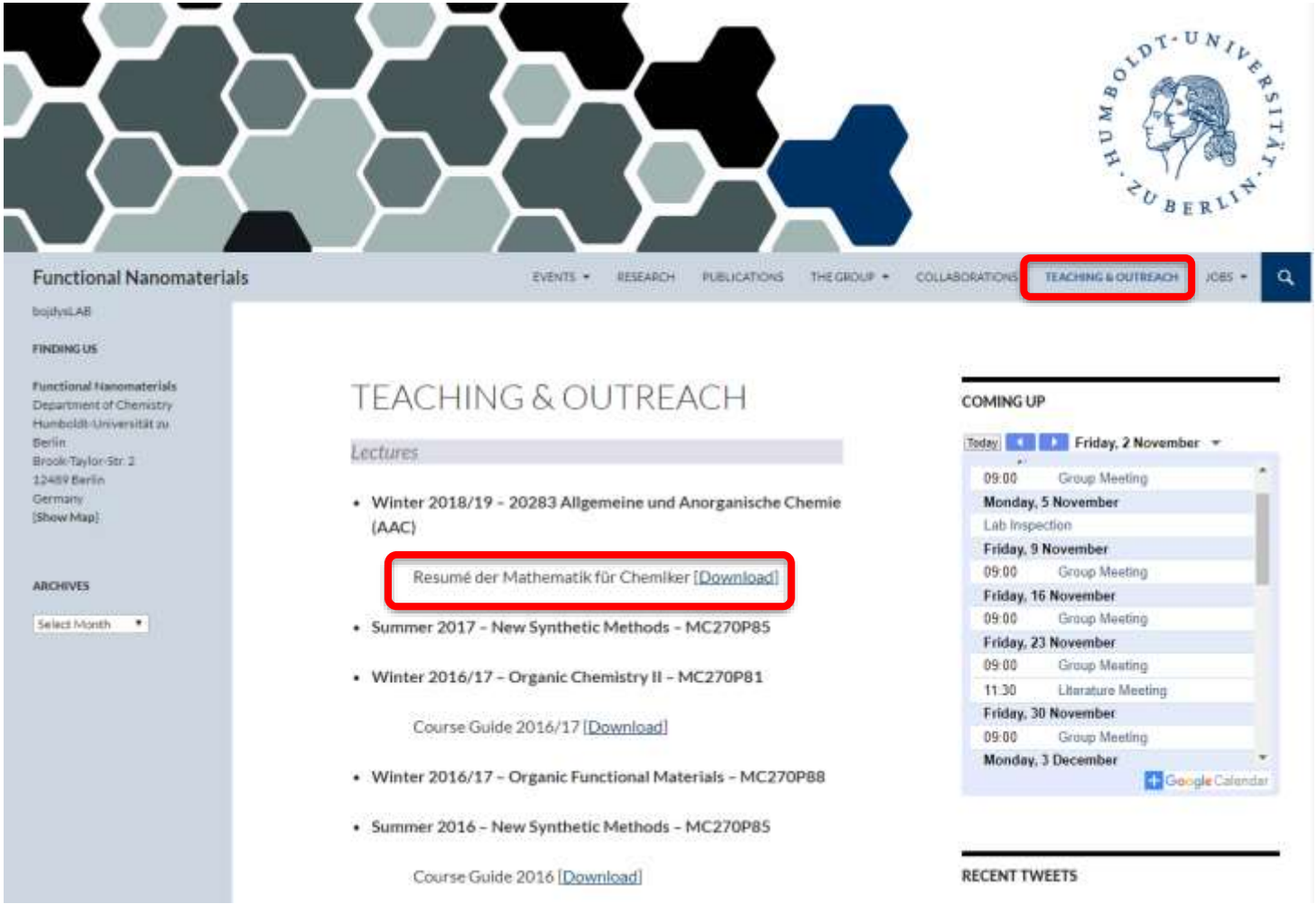
Kartesische- zu Polarkoordinaten

$$x = r \sin\theta \cos\varphi$$
$$y = r \sin\theta \sin\varphi$$
$$z = r \cos\theta$$



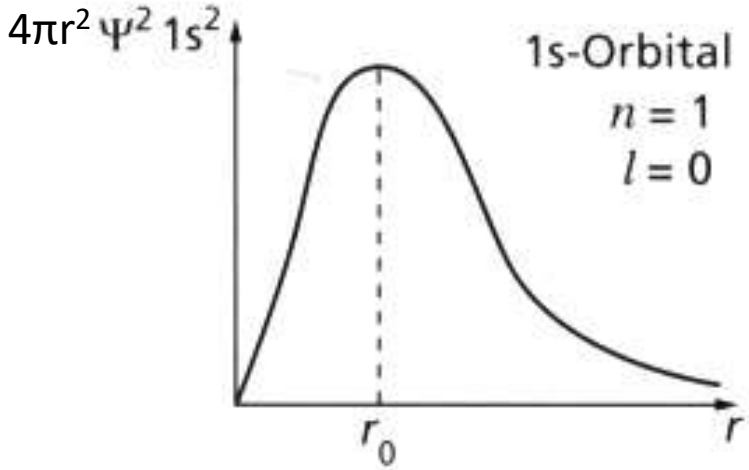
Mehr Mathematik für Chemiker

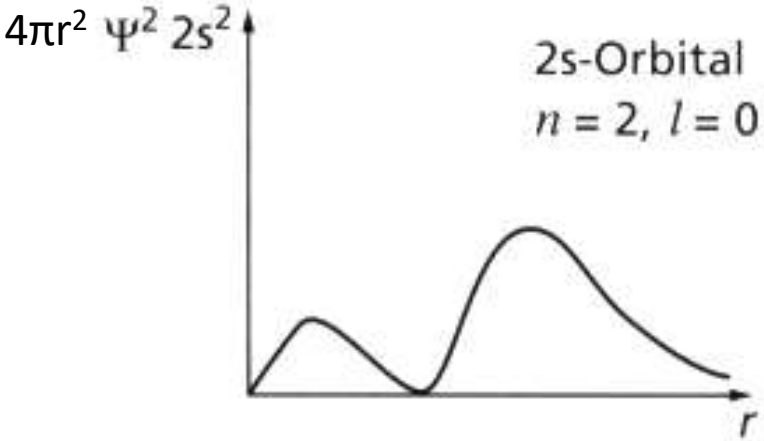
http://bojdyslab.org/teaching/



Die Schrödinger-Gleichung

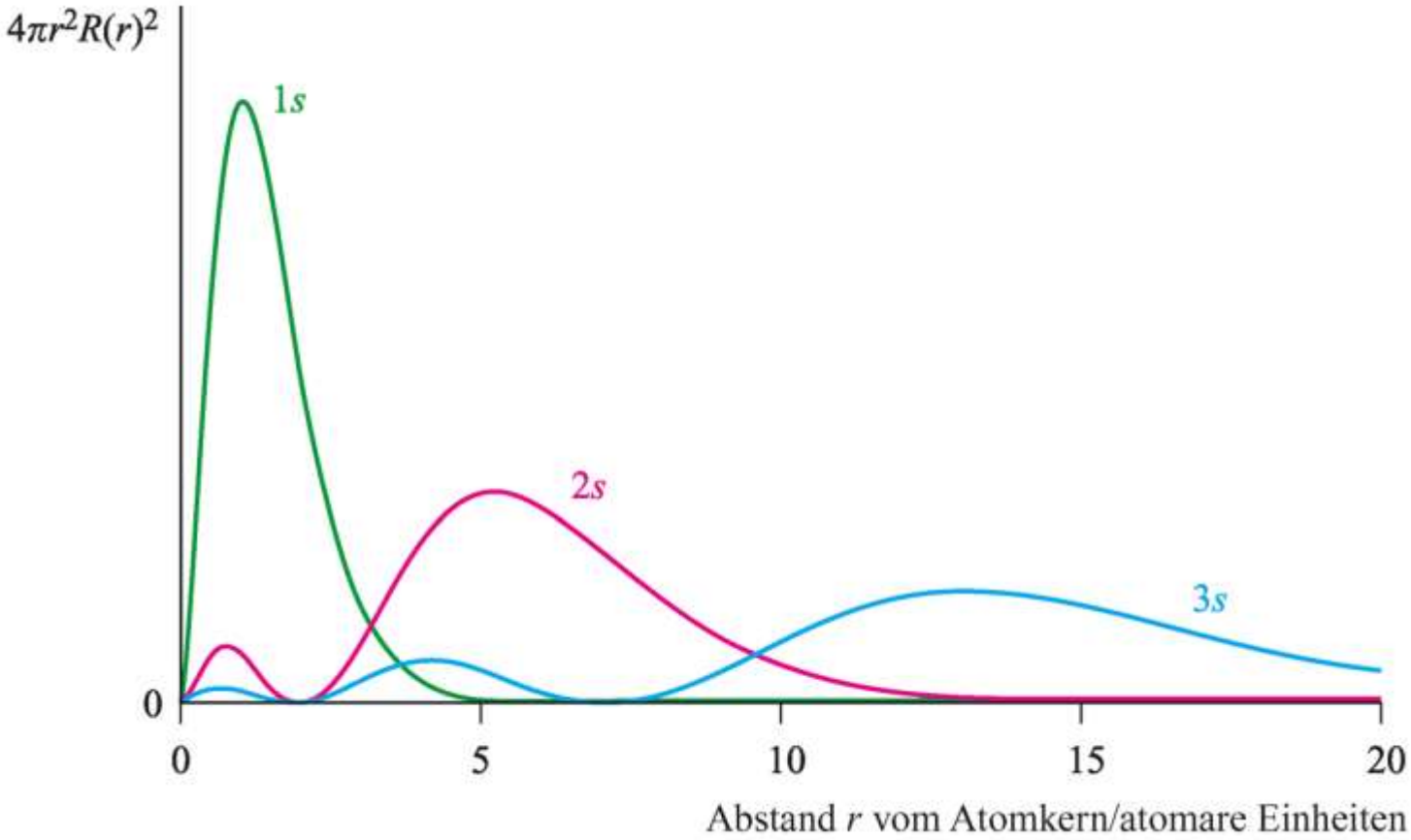
Darstellung des radialabhängigen Teils von Ψ^2





Aus der Darstellung $4\pi r^2 \Psi^2 = 4\pi r^2 R^2(r)$ ist die Wahrscheinlichkeit zu entnehmen, das Elektron in einer Kugleschalre mit dem Radius r anzutreffen. Sie beschreibt die Änderung der Elektronendichte mit steigendem Abstand zum Kern und hängt von den Quantenzahlen n und l ab.

Radiale Elektronendichten abh. von *n*



Radiale Verteilungsfunktionen, $4\pi r^2 R(r)^2$, der 1s-, 2s- und 3s-Atomorbitale des Wasserstoffatoms.

Radiale Elektronendichten abh. von *n*, *l*

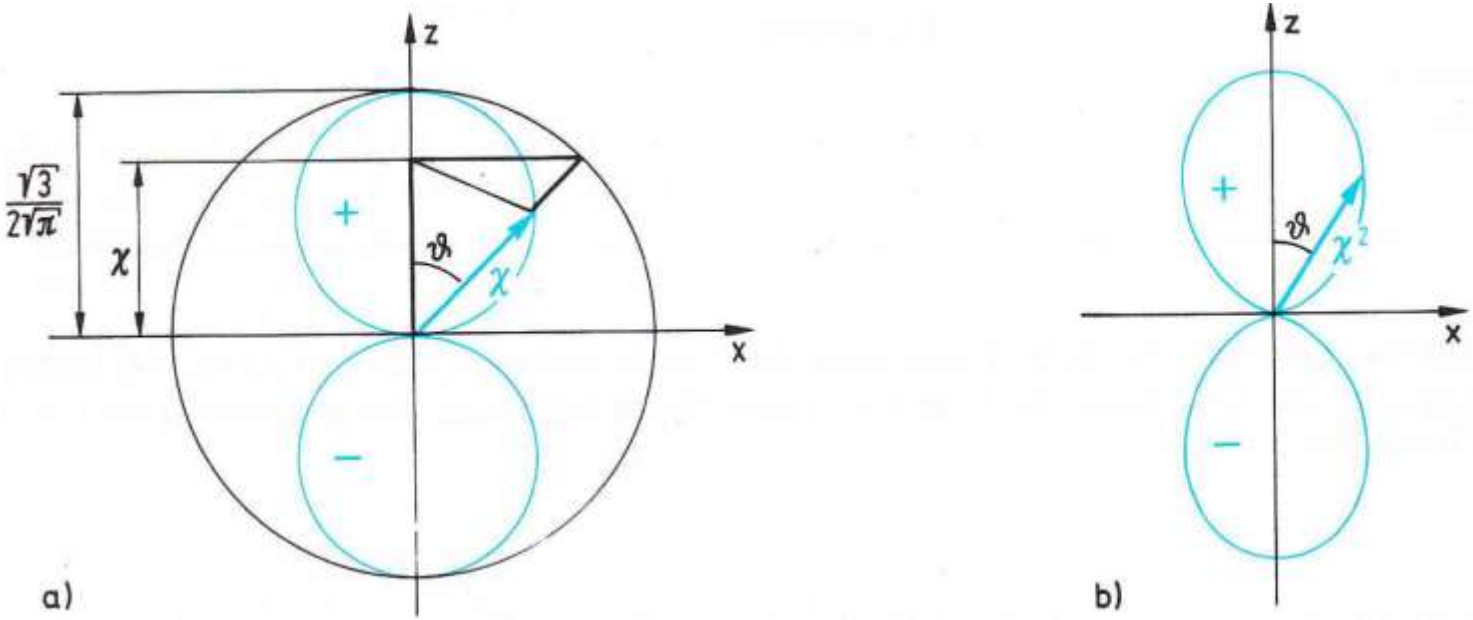
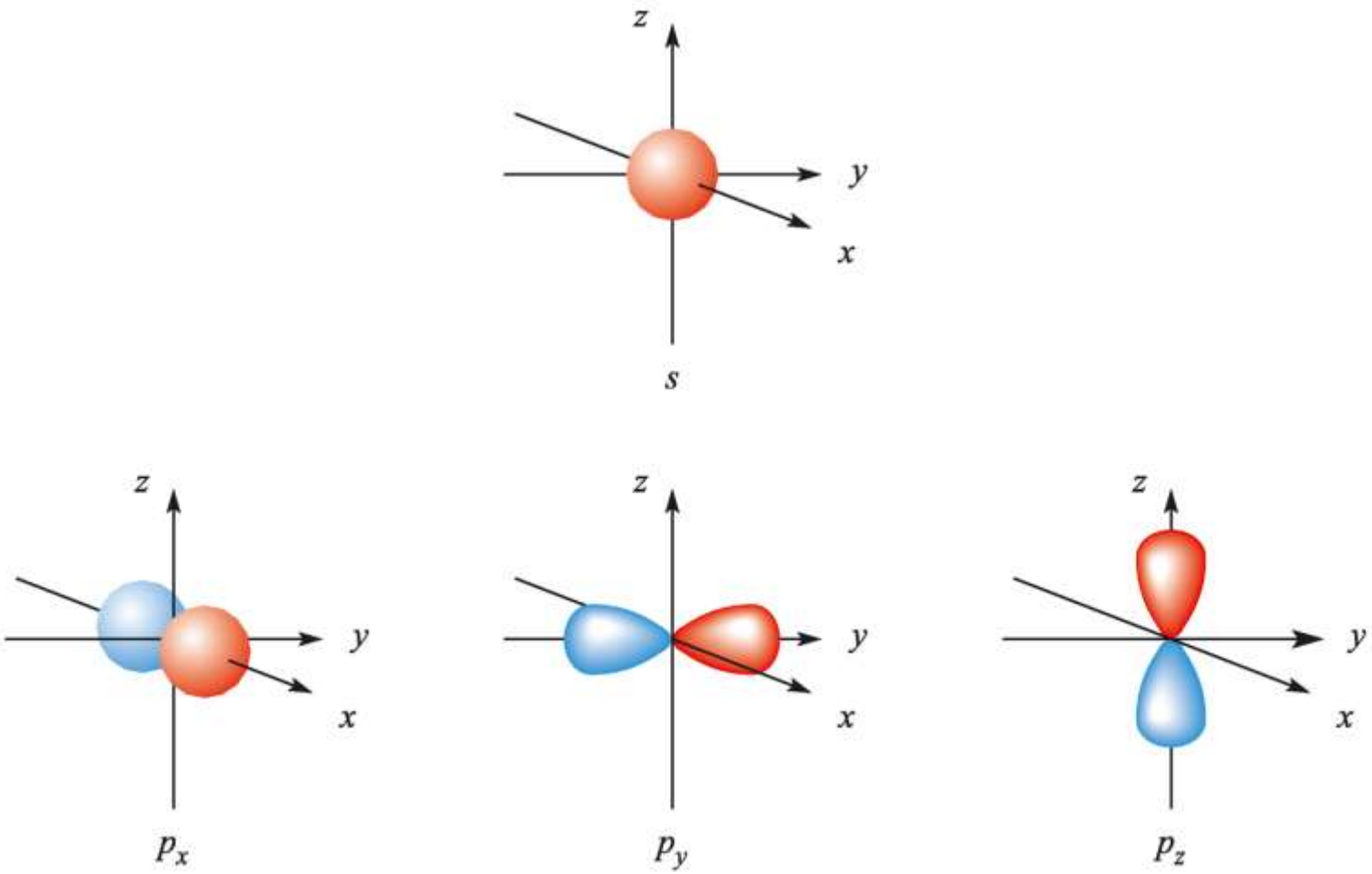


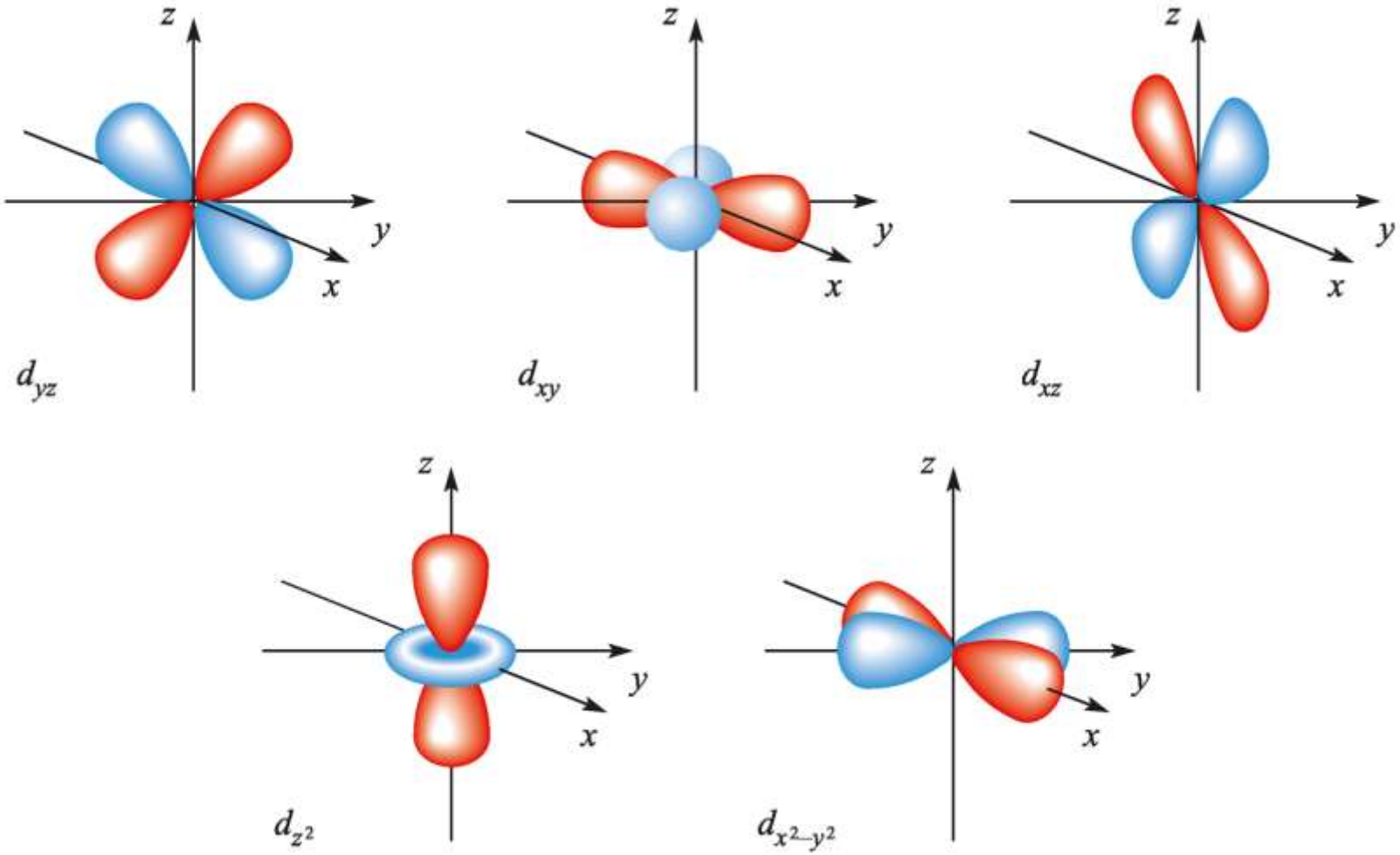
Abbildung 1.33 a) Konstruktion des Polardiagramms für die Winkelfunktion $\chi = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \vartheta$ des p_z-Orbitals. In der x- und y-Richtung hat χ den Wert null, da $\vartheta = 90°$ beträgt. In der z-Richtung ist $\vartheta = 0°$ und $\cos \vartheta = 1$ oder $\vartheta = 180°$ und $\cos \vartheta = -1$. Für die Winkelfunktion erhält man die maximalen Werte $\chi = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}$ bzw. $\chi = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}$. Berechnet man χ für alle mög lichen ϑ-Werte, erhält man zwei Kugeln. Bei der oberen Kugel hat χ ein positives, bei der unteren Kugel ein negatives Vorzeichen. b) Darstellung des Quadrats der Winkelfunktion χ^2 für das p_z-Orbital.

Radiale Elektronendichten abh. von *n*, *l*



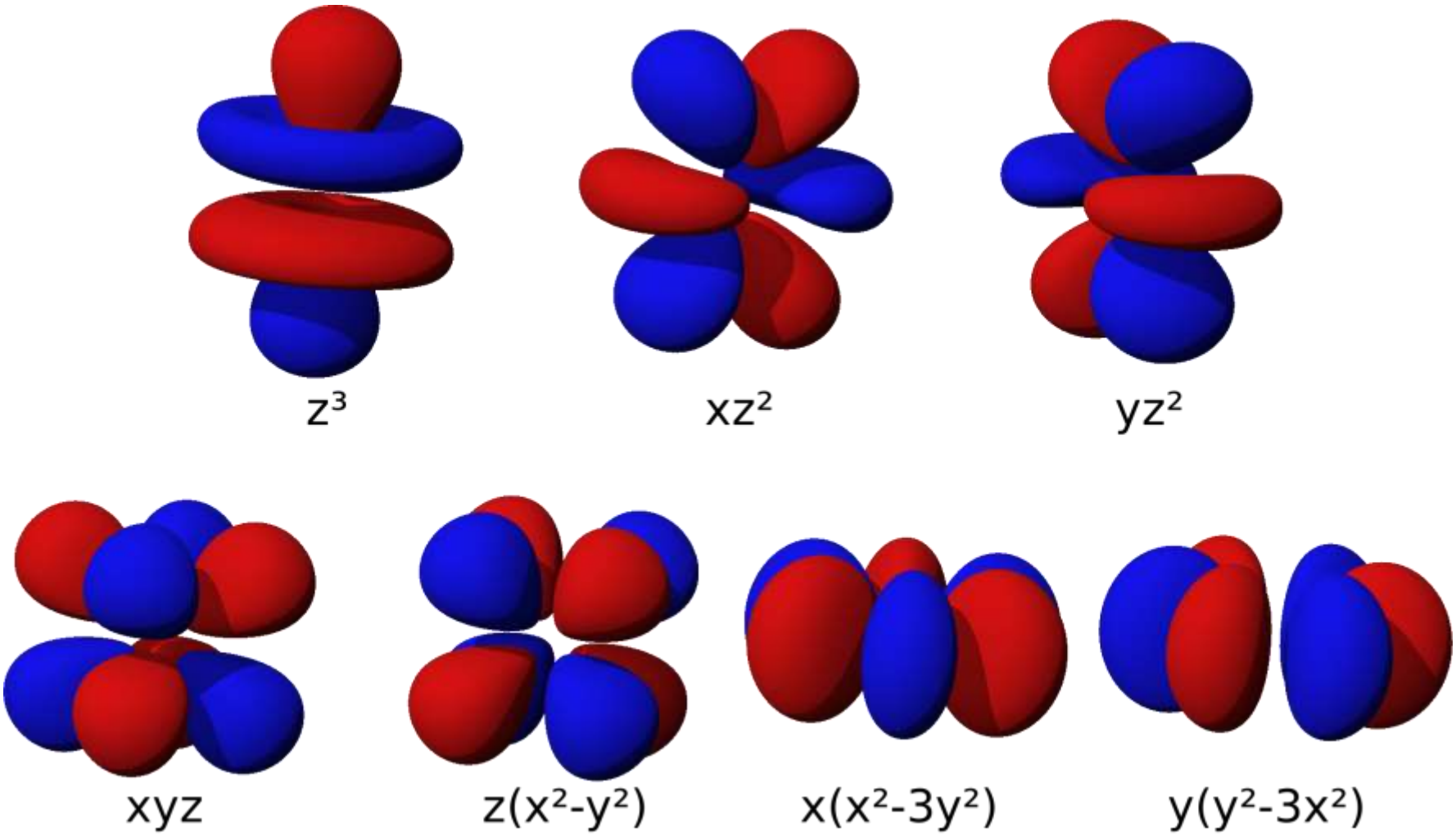
Darstellung eines s- und drei entarteter p-Orbitale. Die Orbitallappen des p_x-Orbitals sind ebenso wie die der p_y- und p_z-Orbitale verlängert, liegen aber auf einer Achse senkrecht zur Papierebene.

Radiale Elektronendichten abh. von *n*, *l*



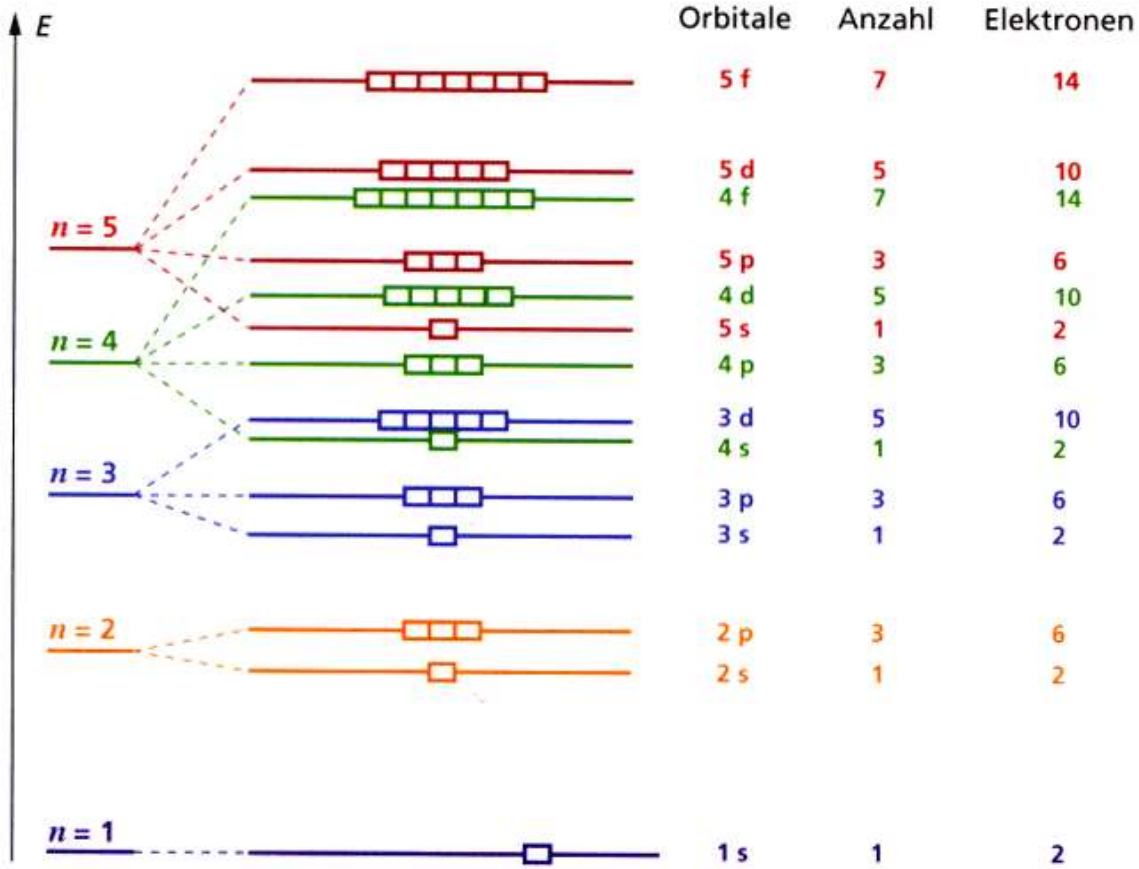
Darstellung fünf entarteter d-Atomorbitale.

Radiale Elektronendichten abh. von *n*, *l*



Darstellung sieben entarteter f-Atomorbitale.

Aufbauprinzip von Atomorbitalen



Nach dem **Aufbauprinzip** werden die Elektronen so in die Atome eingefügt, dass zunächst die kernnächsten, energetisch stabilsten Niveaus mit Elektronen besetzt werden. Erst danach werden entsprechend der energetischen Reihenfolge der **Energieniveaus** schrittweise die weiteren Orbitale besetzt.

1. Die **hundsche Regel** verlangt, dass energiegleiche Orbitale zunächst jeweils mit einem Elektron und erst danach unter Spinpaarung schrittweise mit zwei Elektronen besetzt werden.
2. Das **PAULI-Prinzip** besagt, dass ein durch die drei Quantenzahlen n, l und m charakterisiertes Orbital maximal mit zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin ($s = +½$, $s = -½$) besetzt werden kann.

Elektronenkonfiguration im Mehrelektronensystem

Fast alle Atome bzw. Ionen besitzen mehr als ein Elektron und sind Mehrelektronensysteme. Die Verteilung der Elektronen in den Orbitalen ist die **Elektronenkonfiguration.**

Elektronenverteilung für Energieniveaus mit $n = 1$ bis 3

Schale	n	l	$2l+1$	m	Orbitale	s	Elektronen
K	1	0	1	0	1s	± ½	2
L	2	0	1	0	2s	± ½	2
		1	3	1	2p	± ½	
				0		± ½	6
				–1		± ½	
M	3	0	1	0	3s	± ½	2
		1	3	1	3p	± ½	
				0		± ½	6
				–1		± ½	
		2	5	2	3d	± ½	
				1		± ½	
				0		± ½	10
				–1		± ½	
				–2		± ½	

Die Hauptquantenzahl n ist aus der bohrschen Schalenbezeichnung hervorgegangen. Die maximale Anzahl von Elektronen gleicher Hauptquantenzahl beträgt $2n^2$.

Schale	n	$2n^2$
K	1	2
L	2	8
M	3	18
N	4	32

Die Verteilung der Elektronen auf die **Atomorbitale** (AOs) erfolgt immer in dem Bestreben, einen energetisch stabilen Zustand zu erreichen. Am stabilsten ist der Zustand minimaler Energie.

Elektronenkonfiguration im Mehrelektronensystem

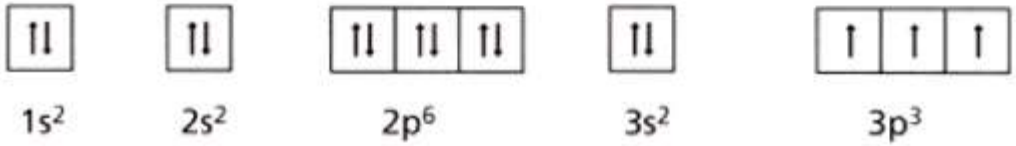
Die Besetzung der Orbitale mit Elektronen nach dem Aufbauprinzip, der hundschen Regel und dem PAULI-Prinzip führt zur Elektronenkonfiguration von Atomen und Ionen.

Elektronenkonfiguration von Atomen

Siliciumatom (14 Elektronen): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^2$

Bromatom (35 Elektronen): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5$

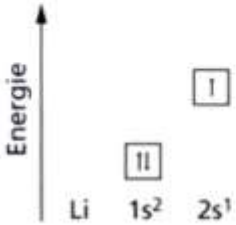
Elektronenkonfiguration des Phosphoratoms



Elektronenkonfiguration des Iodatoms: $[Kr]\ 5s^2\ 4d^{10}\ 5p^5$

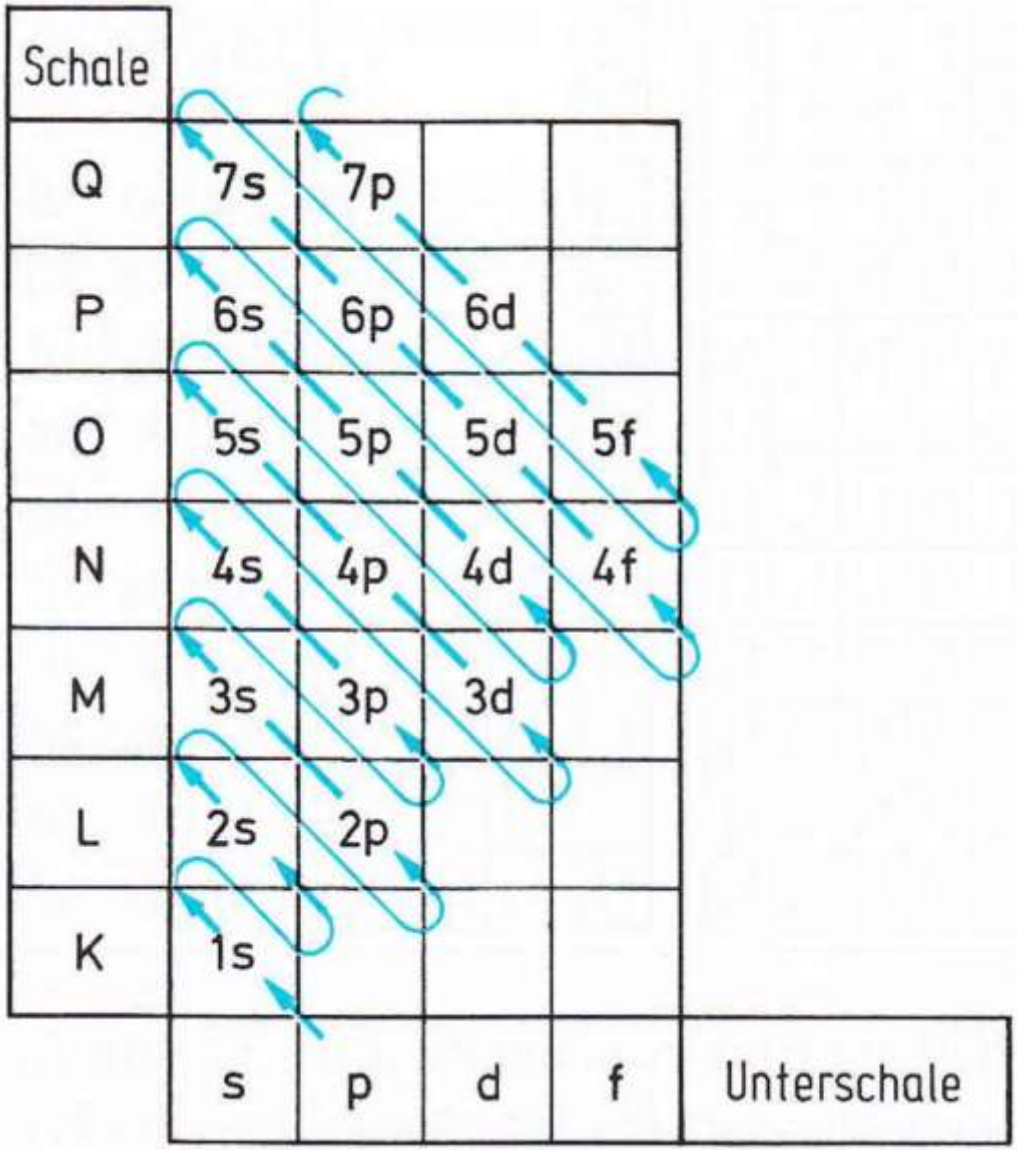
Elektronenkonfiguration des Uranatoms: $[Rn]\ 7s^2\ 6d^1\ 5f^4$

Der Kästchenschreibweise kann man nicht nur den Spin entnehmen, sondern man kann auch, wie im Kästchenschema des Lithiumatoms, die unterschiedliche Energie der Orbitale andeuten.

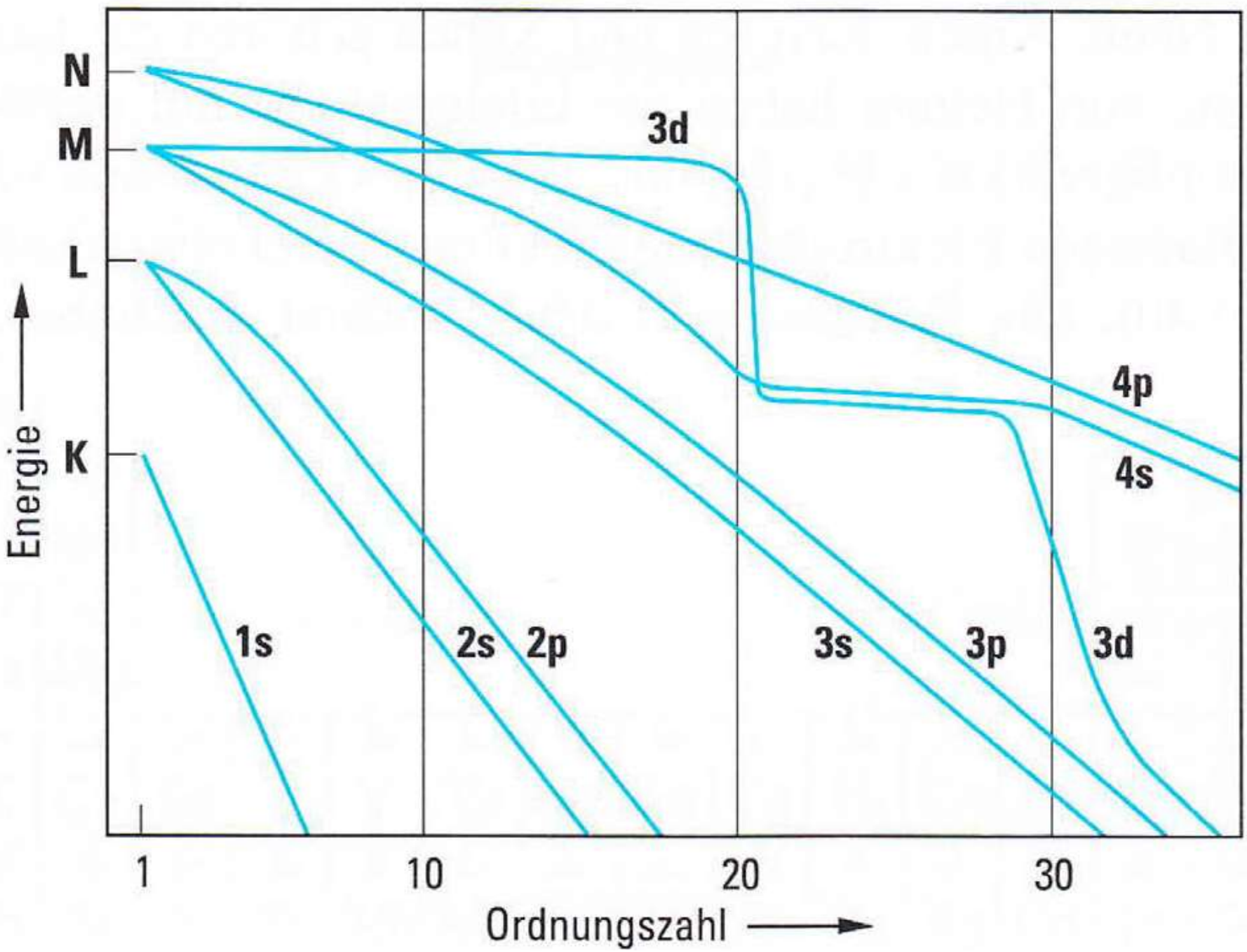


In der Regel gibt man nur die Besetzung der Orbitale mit der höchsten Hauptquantenzahl, d.h. die **Valenzelektronenkonfiguration** ausführlich an. Die Rumpfelektronen werden durch das in eckigen Klammern stehende Elementsymbol des vorhergehenden Edelgases symbolisiert.

Reihenfolge der Besetzung von Unterschalen



Änderung der Energie der Unterschalen mit Ordnungszahl



Elektronenkonfiguration der ersten 36 Elemente

Z	Element	K 1s	L 2s	L 2p	M 3s	M 3p	M 3d	N 4s	N 4p	Symbol	Periode
1	H	↑								$1s^1$	1
2	He	↑↓								$1s^2$	
3	Li	↑↓	↑							[He] $2s^1$	2
4	Be	↑↓	↑↓							[He] $2s^2$	
5	B	↑↓	↑↓	↑						[He] $2s^2 2p^1$	
6	C	↑↓	↑↓	↑ ↑						[He] $2s^2 2p^2$	
7	N	↑↓	↑↓	↑ ↑ ↑						[He] $2s^2 2p^3$	
8	O	↑↓	↑↓	↑↓ ↑ ↑						[He] $2s^2 2p^4$	
9	F	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑						[He] $2s^2 2p^5$	
10	Ne	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓						[He] $2s^2 2p^6$	
11	Na	Neonkonfiguration [Ne]			↑					[Ne] $3s^1$	3
12	Mg				↑↓					[Ne] $3s^2$	
13	Al				↑↓	↑				[Ne] $3s^2 3p^1$	
14	Si				↑↓	↑ ↑				[Ne] $3s^2 3p^2$	
15	P				↑↓	↑ ↑ ↑				[Ne] $3s^2 3p^3$	
16	S				↑↓	↑↓ ↑ ↑				[Ne] $3s^2 3p^4$	
17	Cl				↑↓	↑↓ ↑↓ ↑				[Ne] $3s^2 3p^5$	
18	Ar				↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓				[Ne] $3s^2 3p^6$	
19	K	Argonkonfiguration [Ar]						↑		[Ar] $4s^1$	4
20	Ca							↑↓		[Ar] $4s^2$	
21	Sc						↑	↑↓		[Ar] $4s^2 3d^1$	
22	Ti						↑ ↑	↑↓		[Ar] $4s^2 3d^2$	
23	V						↑ ↑ ↑	↑↓		[Ar] $4s^2 3d^3$	
24	*Cr						↑ ↑ ↑ ↑ ↑	↑		[Ar] $4s^1 3d^5$	
25	Mn						↑ ↑ ↑ ↑ ↑	↑↓		[Ar] $4s^2 3d^5$	
26	Fe						↑↓ ↑ ↑ ↑ ↑	↑↓		[Ar] $4s^2 3d^6$	
27	Co						↑↓ ↑↓ ↑ ↑ ↑	↑↓		[Ar] $4s^2 3d^7$	
28	Ni						↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑	↑↓		[Ar] $4s^2 3d^8$	
29	*Cu						↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑		[Ar] $4s^1 3d^{10}$	
30	Zn						↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓		[Ar] $4s^2 3d^{10}$	
31	Ga						↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑	[Ar] $4s^2 3d^{10} 4p^1$	
32	Ge						↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑ ↑	[Ar] $4s^2 3d^{10} 4p^2$	
33	As						↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑ ↑ ↑	[Ar] $4s^2 3d^{10} 4p^3$	
34	Se						↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑↓ ↑ ↑	[Ar] $4s^2 3d^{10} 4p^4$	
35	Br						↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑	[Ar] $4s^2 3d^{10} 4p^5$	
36	Kr						↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	[Ar] $4s^2 3d^{10} 4p^6$	

Das moderne PSE

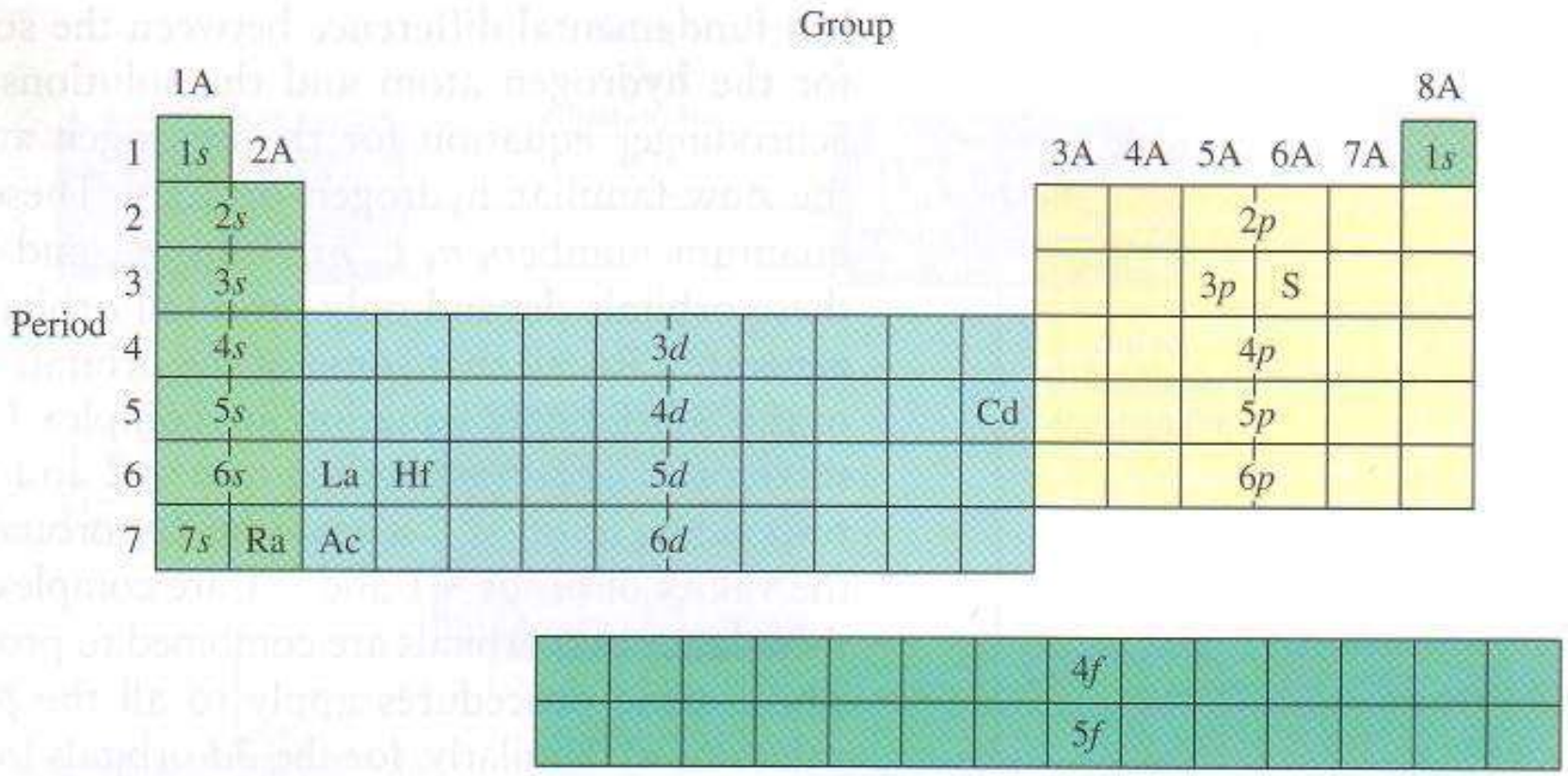
s-Block Elemente		d-Block Elemente										p-Block Elemente					
Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 3	Gruppe 4	Gruppe 5	Gruppe 6	Gruppe 7	Gruppe 8	Gruppe 9	Gruppe 10	Gruppe 11	Gruppe 12	Gruppe 13	Gruppe 14	Gruppe 15	Gruppe 16	Gruppe 17	Gruppe 18
1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57–71 La–Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89–103 Ac–Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Uub						

f-Block Elemente

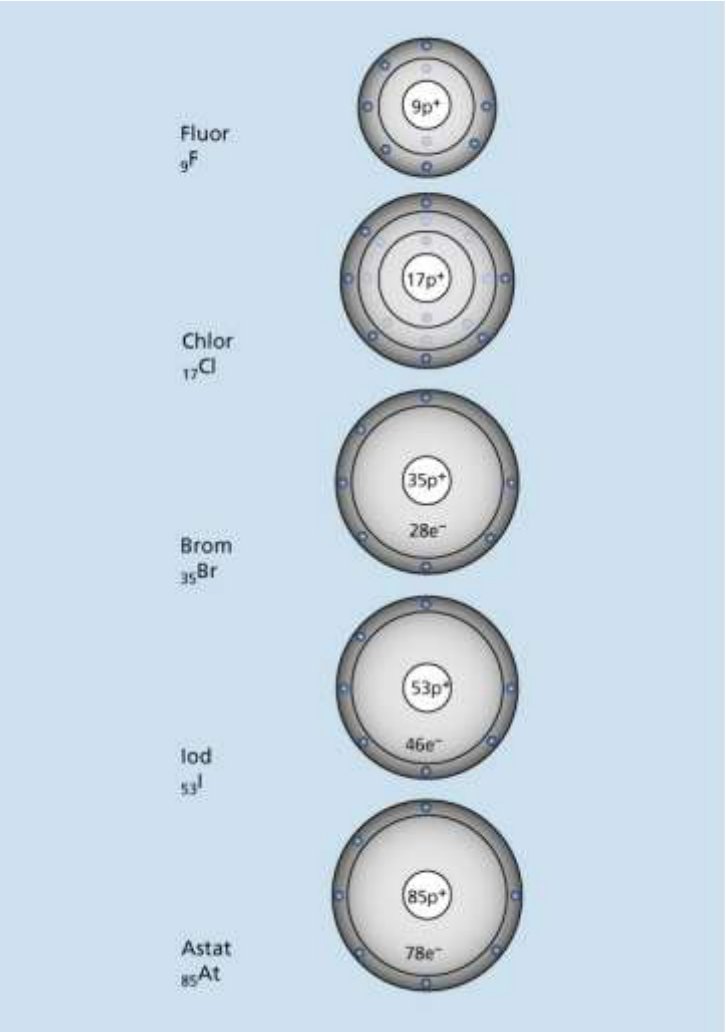
Lanthanoiden	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
Actinoiden	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Das moderne Periodensystem, in dem die Elemente in numerischer Reihenfolge der Anzahl ihrer Protonen (und Elektronen) angeordnet sind. Einteilung in Gruppen fasst Elemente mit der gleichen Anzahl an Valenzelektronen in der gleichen vertikale Spalte zusammen. Gruppen werden mit Nummern von 1-18 gekennzeichnet. Reihen innerhalb des Periodensystems werden Perioden genannt.

Das moderne PSE



Das moderne PSE - Gruppen

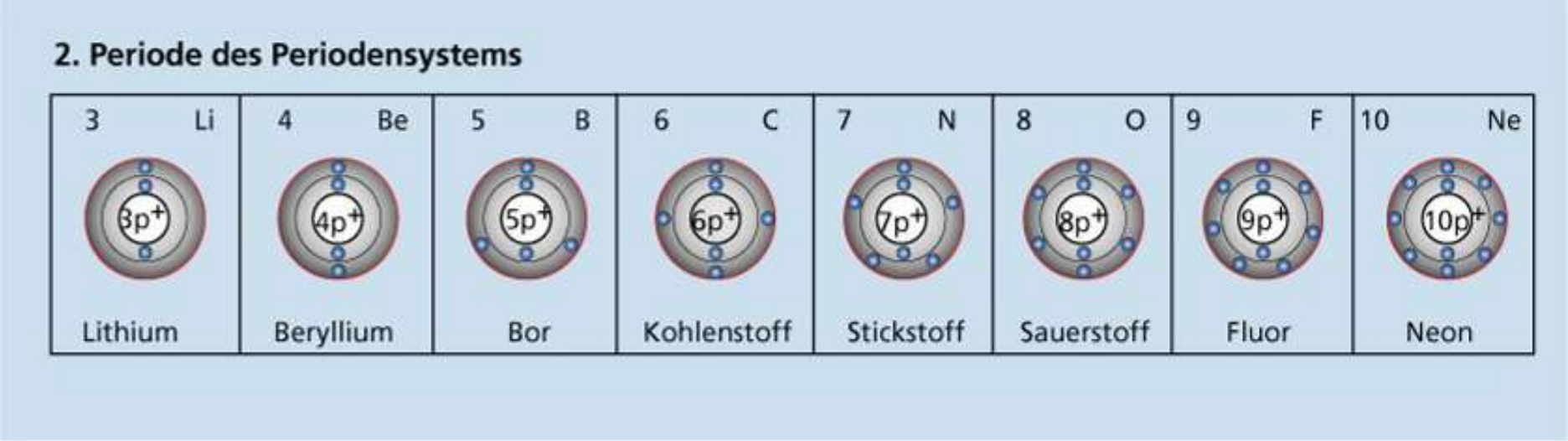


Ordnet man die Elemente mit Zunehmender Kernladungszahl (Ordnungszahl) erhält man das Periodensystem der Elemente (PSE).

Chemisch ähnliche („verwandte“) Elemente Werden dabei in Gruppen zusammengefasst.

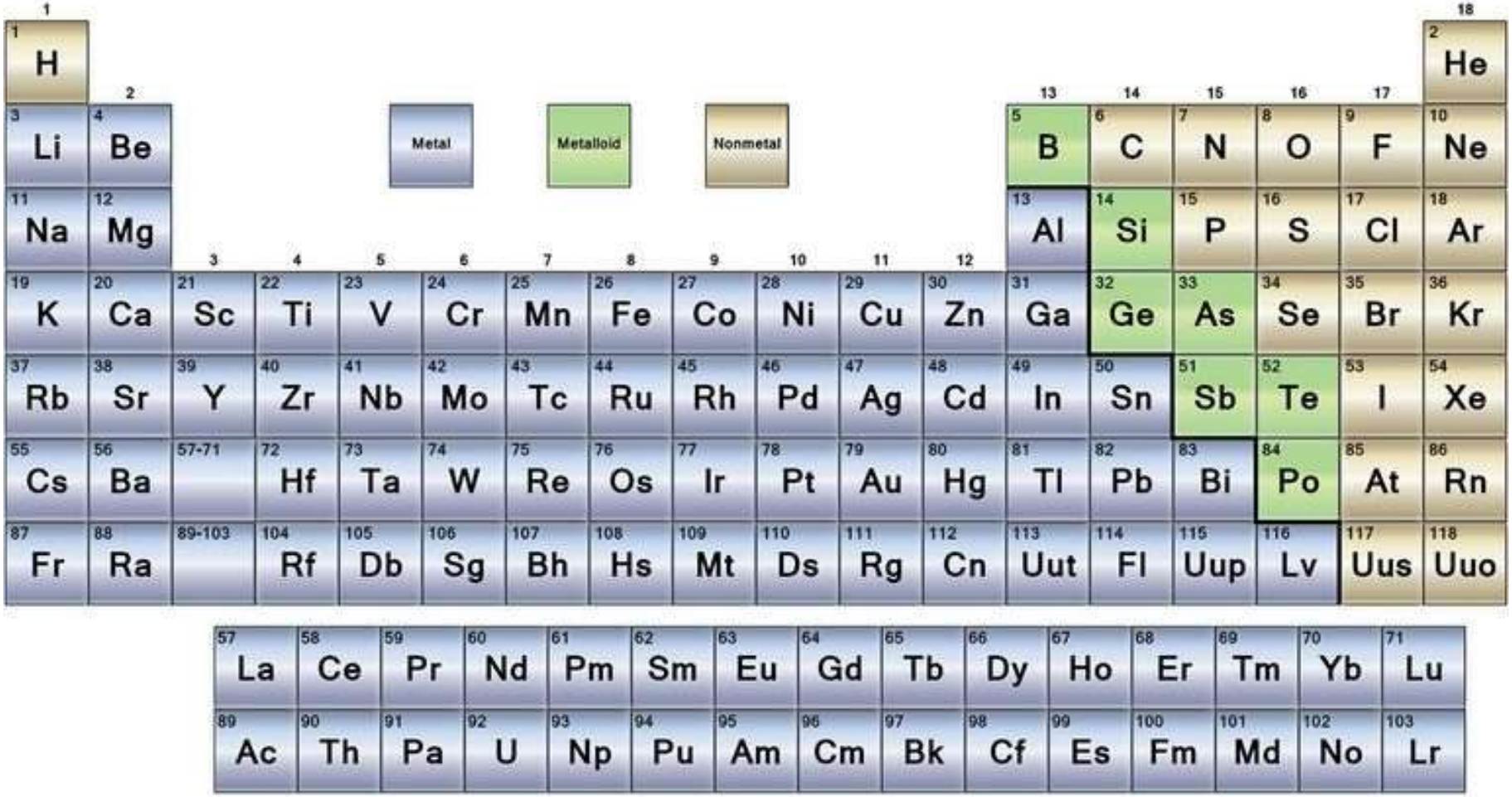
In einer Gruppe haben alle Atome die gleiche **Valenzelektronenkonfiguration**.

Das moderne PSE - Perioden

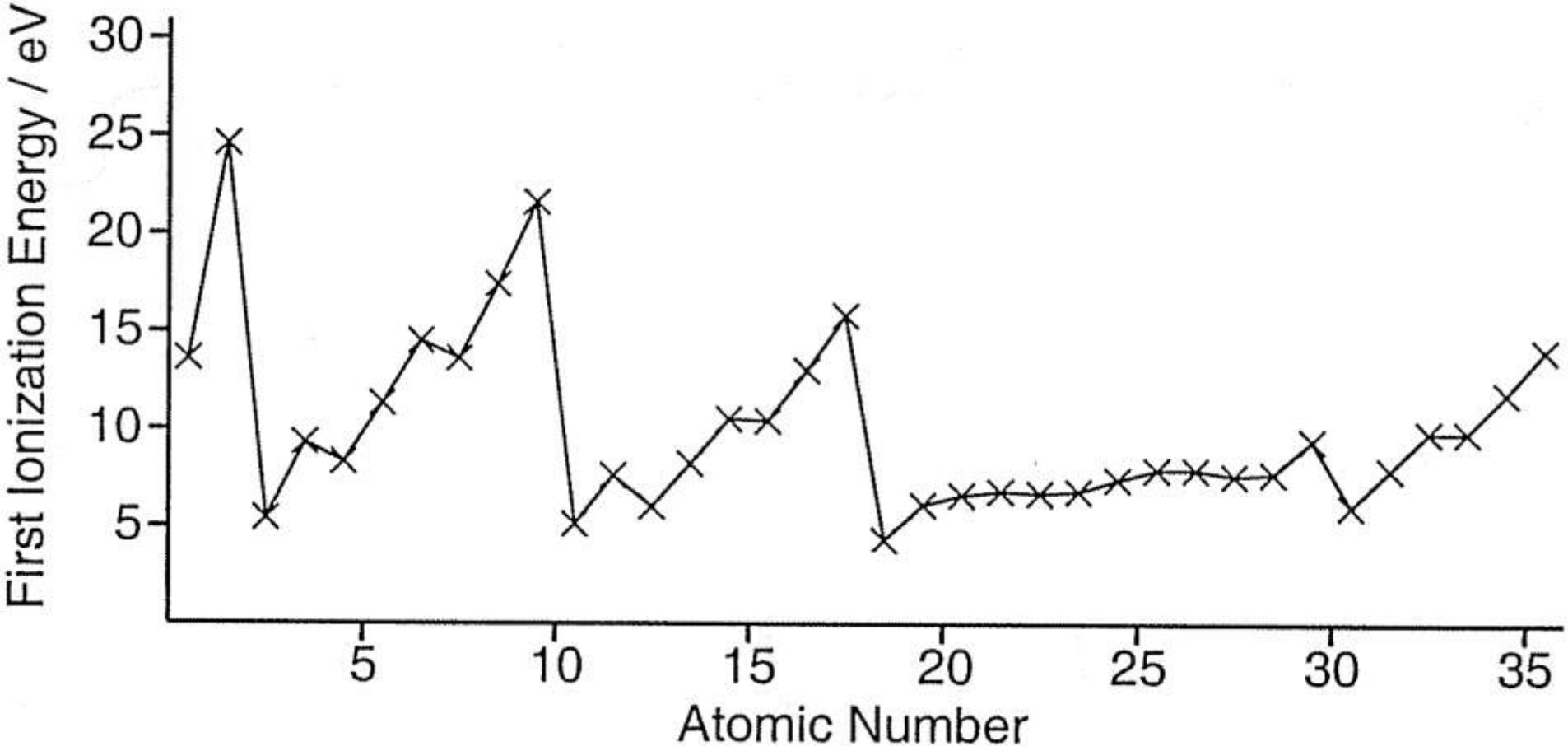


Durch das Ordnen nach steigender Kernladungszahl entstehen die Perioden.
Eine Periode endet, wenn die äußere Elektronenschale vollständig mit Elektronen besetzt ist. (Oktettregel)

Metallischer und nichtmetallischer Charakter



Metallischer und nichtmetallischer Charakter



Ionisiserungsenergien für Metalle der dritten Periode

		Ionisierungsenergien/kJ · mol^{-1}			
Metall	Gruppe	erste	zweite	dritte	vierte
Na	I A	+ 496	+ 4563	+ 6913	+ 9541
Mg	II A	+ 738	+ 1450	+ 7731	+ 10545
Al	III A	+ 577	+ 1816	+ 2744	+ 11575

Elektronenaffinität

Der Energiebetrag, der bei der Aufnahme eines Elektrons durch ein gasförmiges Atom oder Ion abgegeben oder verbraucht wird, ist die **Elektronenaffinität** (ΔE_A).

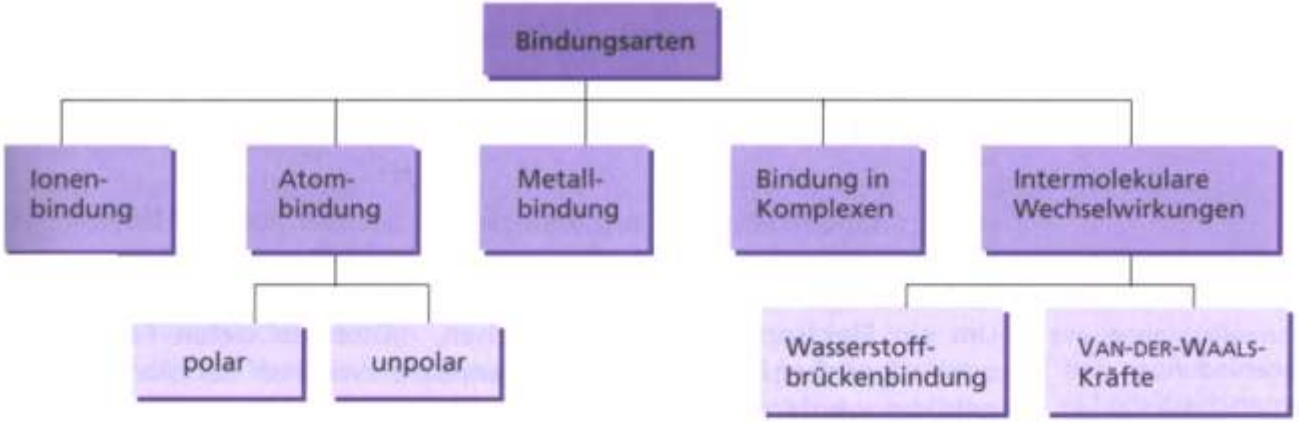
$$A(g) + e^- \longrightarrow A^-(g) \qquad \Delta E = \Delta E_A$$

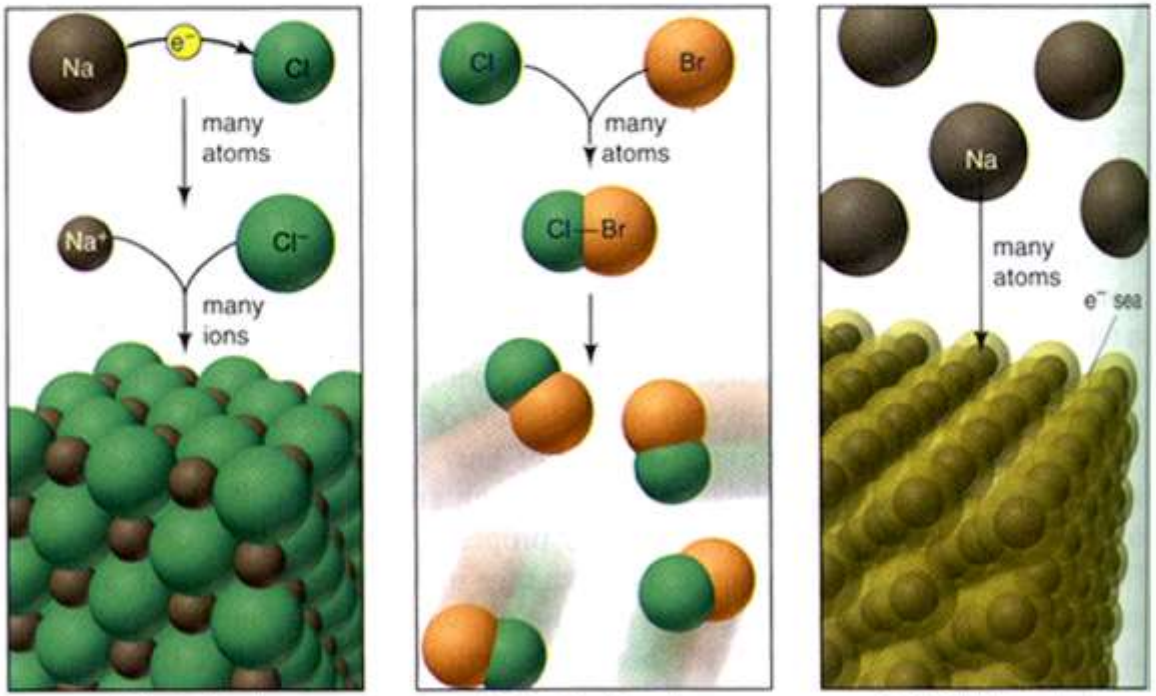
Elektronenaffinitäten einiger Elemente

Element	ΔE_A in eV	Element	ΔE_A in eV
H	–0,76	O	–1,46
Li	–0,62	F	–3,40
Be	+0,50	Ne	+0,35
B	–0,23	Cl	–3,60
C	–1,26	Br	–3,35
N	+0,07	I	–3,10

$$O(g) + e^- \longrightarrow O^-(g) \qquad \Delta E_A = -1{,}46\ \text{eV}$$
$$O^-(g) + e^- \longrightarrow O^{2-}(g) \qquad \Delta E_A = +8{,}1\ \text{eV}$$

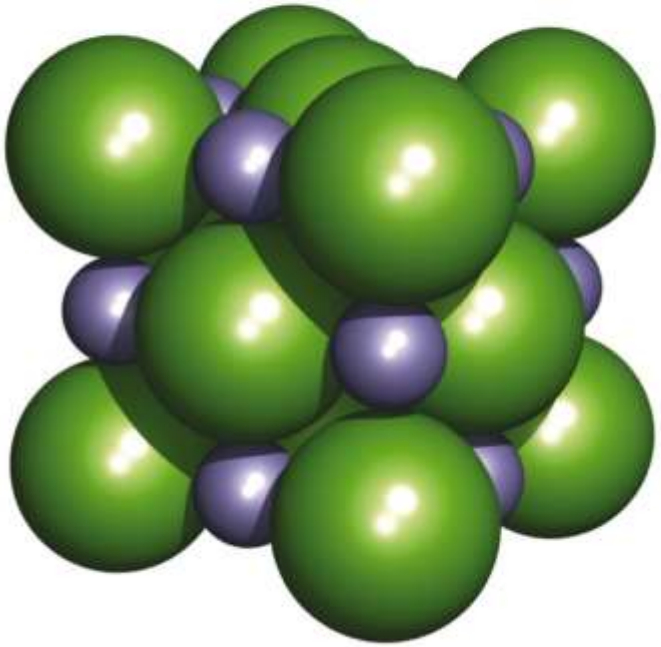
Bindungsarten



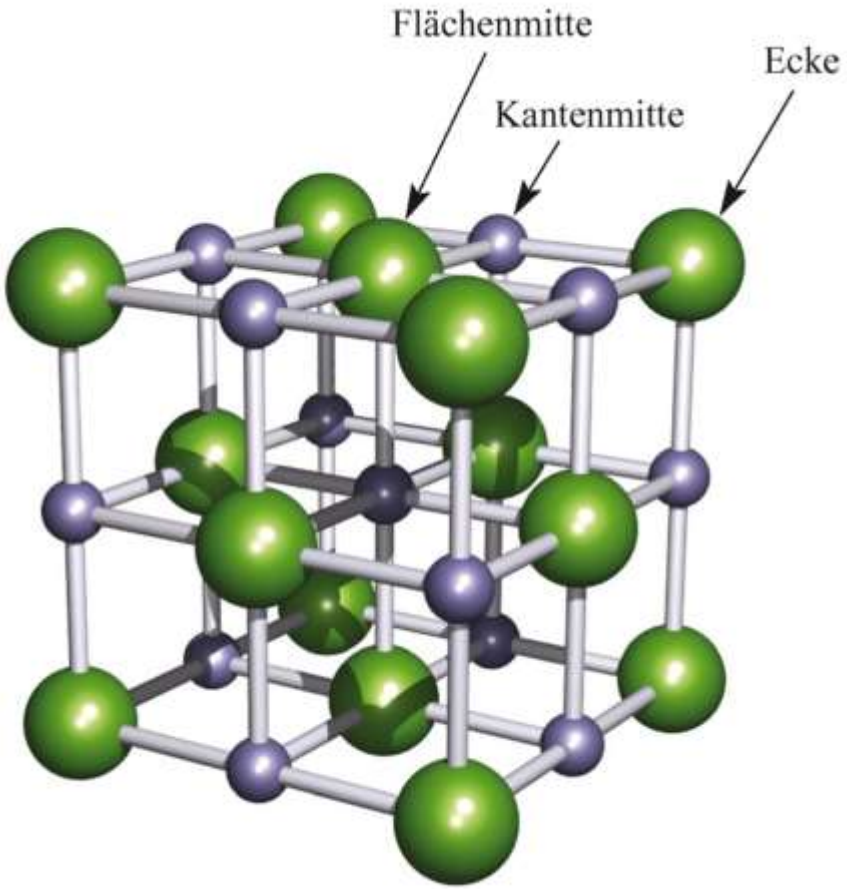


A Ionic bonding **B** Covalent bonding **C** Metallic bonding

Elementarzelle des NaCl



(a)



(b)

Zwei Darstellungen der Elementarzelle des NaCl: (a) zeigt eine raumerfüllende Darstellung, und (b) ein Kugel-Stab-Modell. Die Cl^--Ionen sind grün und die Na^+-Ionen violett dargestellt. Es existieren vier verschiedene Typen von Gitterplätzen in der Elementarzelle: im Zentrum, auf den Seitenflächen, den Kantenmitten und den Ecken

Ionenradien (in pm)

(Ionenradien werden häufig auch in der Einheit Ångström angegeben; 1 Å = 10^{-10} m = 100 pm).

H^-	154	Be^{2+}	45	Al^{3+}	54	Si^{4+}	40
F^-	133	Mg^{2+}	72	Ga^{3+}	62	Sn^{4+}	69
Cl^-	181	Ca^{2+}	100	Tl^{3+}	89	Pb^{4+}	78
Br^-	196	Sr^{2+}	118	Bi^{3+}	103	Ti^{4+}	61
I^-	220	Ba^{2+}	135	Sc^{3+}	75	V^{4+}	58
O^{2-}	140	Sn^{2+}	93	Ti^{3+}	67	Mn^{4+}	53
S^{2-}	184	Pb^{2+}	119	V^{3+}	64	Zr^{4+}	72
N^{3-}	171	Ti^{2+}	86	Cr^{3+}	62	Pd^{4+}	62
Li^+	76	V^{2+}	79	Mn^{3+}	65	Hf^{4+}	71
Na^+	102	Cr^{2+}	80	Fe^{3+}	65	W^{4+}	66
K^+	138	Mn^{2+}	83	Co^{3+}	61	Pt^{4+}	63
Rb^+	152	Fe^{2+}	78	Ni^{3+}	60	Ce^{4+}	87
Cs^+	167	Co^{2+}	75	Rh^{3+}	67	U^{4+}	89
NH_4^+	143	Ni^{2+}	69	La^{3+}	103	V^{5+}	54
Tl^+	150	Cu^{2+}	73	Au^{3+}*	85	Nb^{5+}	64
Cu^+	77	Zn^{2+}	74	Ce^{3+}	101	Ta^{5+}	64
Ag^+	115	Pd^{2+}*	86	Gd^{3+}	94	Cr^{6+}	44
Au^+	137	Cd^{2+}	95	Lu^{3+}	86	Mo^{6+}	59
		Pt^{2+}*	80	V^{3+}	64	W^{6+}	60
		Hg^{2+}	102			U^{6+}	73

Die Radien gelten für die Koordinationszahl 6. Nur die mit * bezeichneten Radien sind für die quadratisch-planare Koordination angegeben.

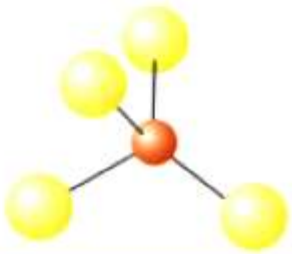
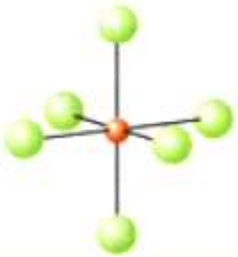
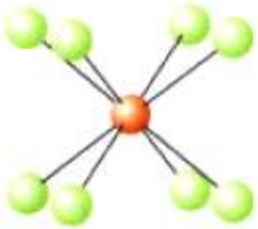
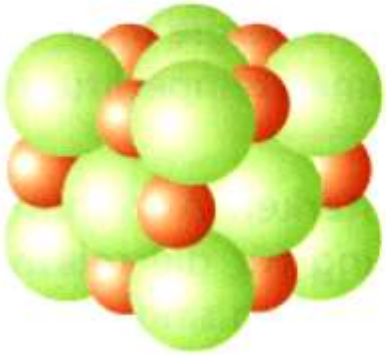
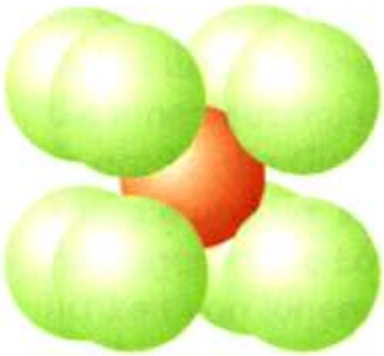
Die Radien der Kationen sind empirische Radien, die aus Oxiden und Fluoriden ermittelt wurden. Sie entstammen dem Radiensatz von Shannon und Prewitt (Acta Crystallogr. (1976) A32, 751) Dort sind auch die Radien für andere Koordinationszahlen angegeben. Daraus wurde die oben angegebene mittlere Änderung der Radien mit der KZ ermittelt. Der Einfluss des Spinzustandes auf die Ionengröße wird im Abschn. 5.7.6 „Ligandenfeldtheorie" behandelt.

Atom- und Ionenradien (in pm)

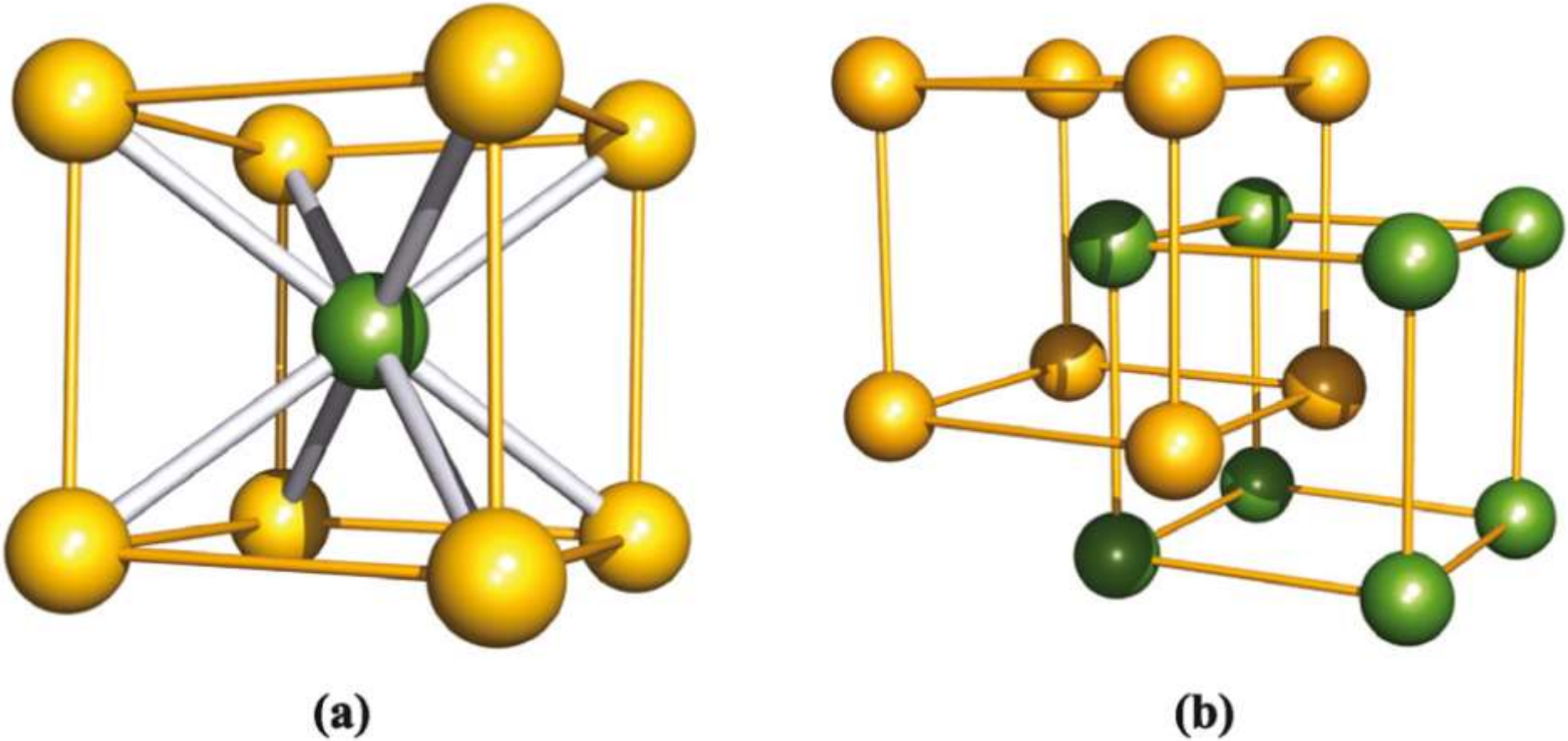
Vergleich von Atom- und Ionenradien einiger Elemente

Atom	*r* (in pm)	Ion	*r* (in pm)
F	64	F^-	136
Cl	99	Cl^-	181
Br	114	Br^-	195
Na	186	Na^+	95
K	231	K^+	133
Cs	262	Cs^+	169

Radienquotient und Koordinationszahl

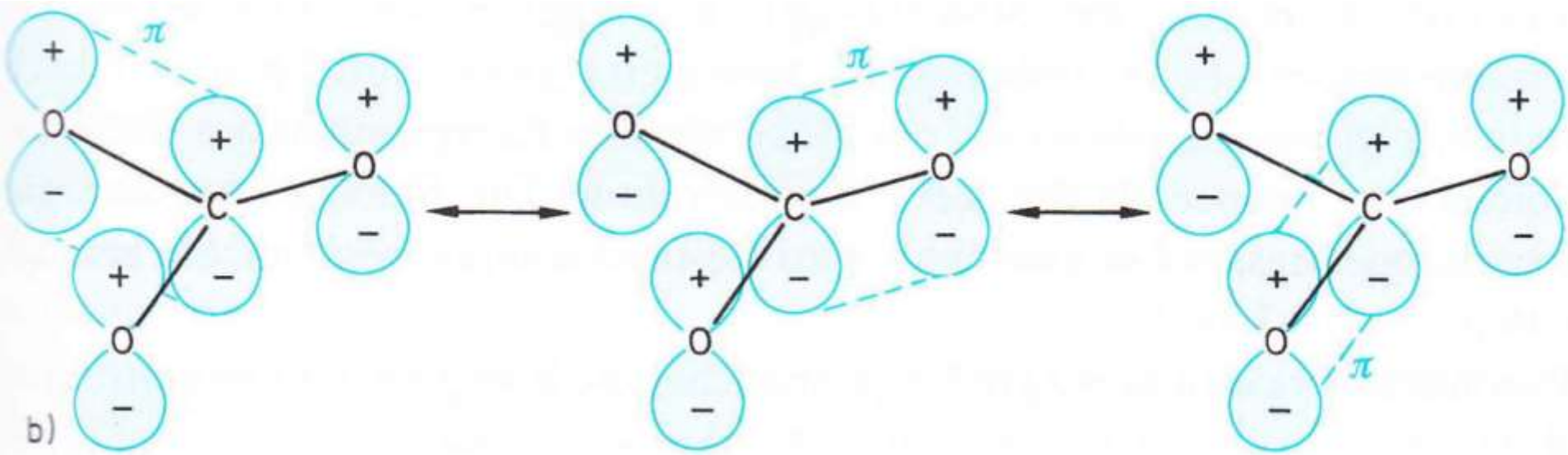
Gittertyp	ZnS-Gitter	NaCl-Gitter	CsCl-Gitter
$r_{Kation} : r_{Anion}$	< 0,41	0,41 – 0,73	> 0,73
Koordinationszahl	4	6	8
Kugel-Stab-Modell			
Packungsmodell			

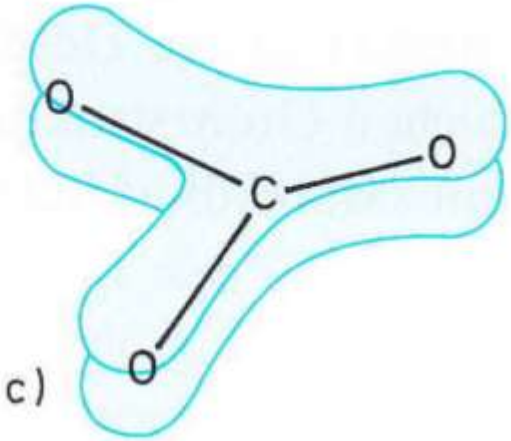
Elementarzelle des CsCl



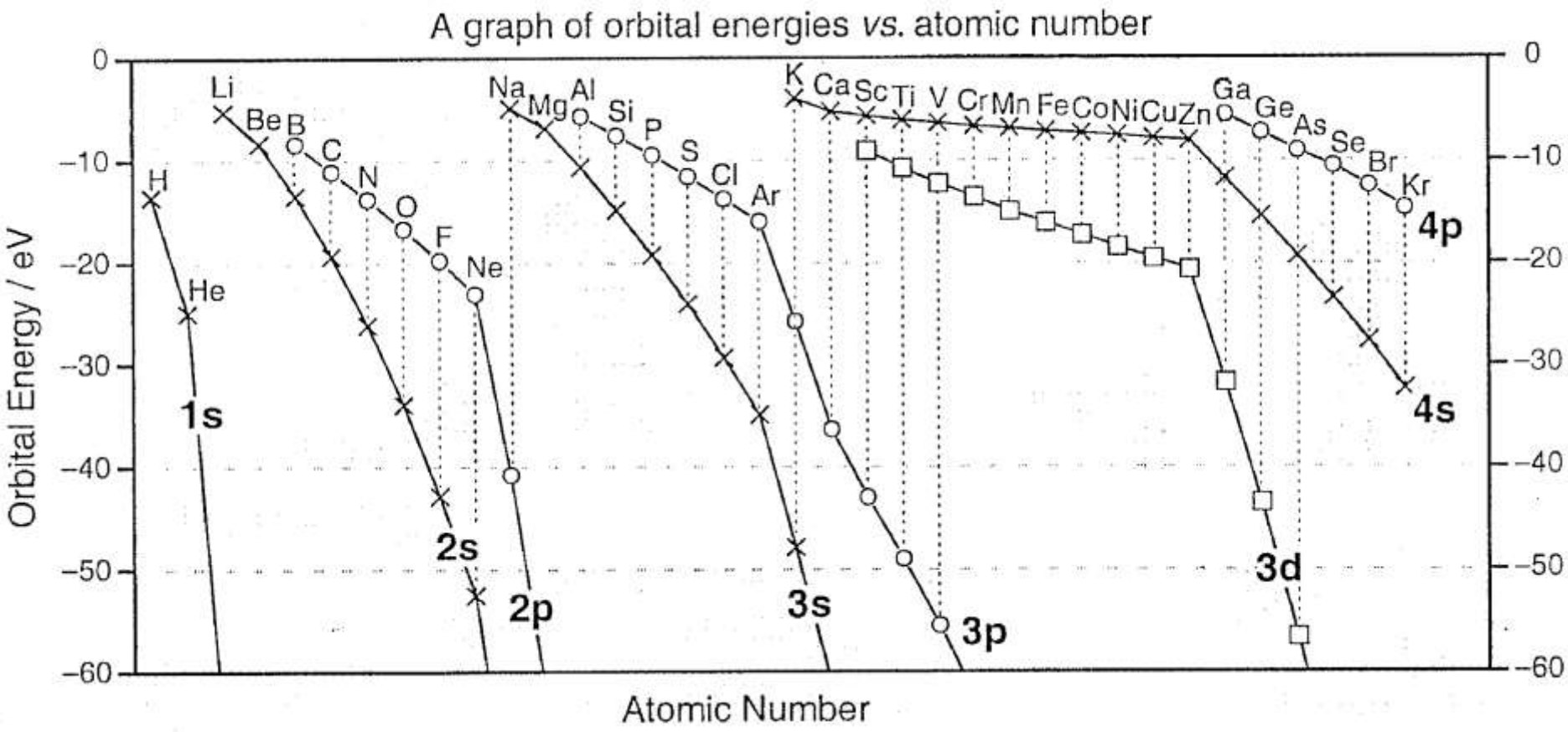
(a) Die Elementarzelle des CsCl; Cs_+-Ionen sind gelb und Cl_--Ionen grün dargestellt. Die Elementarzelle könnte ebefalls mit dem Cs_+-Ion im Zentrum dargestellt werden. Die Elementarzelle wird durch die gelben Linien definiert. (b) Das CsCl-Gitters lässt sich auch in Form von interpenetrierenden kubischen Einheiten von Cs_+- und Cl_--Ionen beschreiben.

Grenzstrukturen des Karbonat-Ions





Orbitalenergie und Elektronegativität



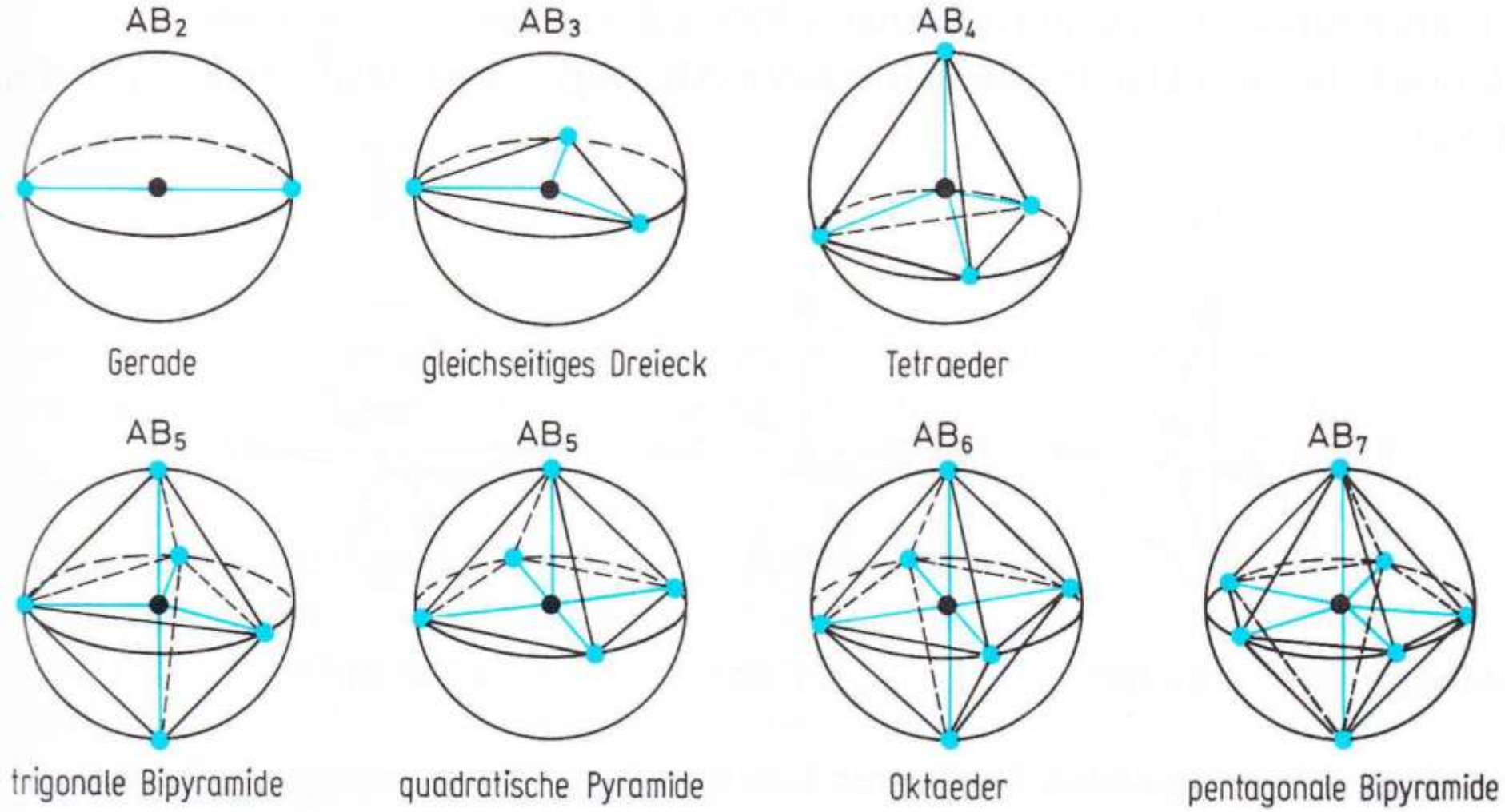
Elektronegativitäten

Electronegativities

Symbol
$\chi_{Pauling}$
$\chi_{A\text{-}R}$
χ_{spec}

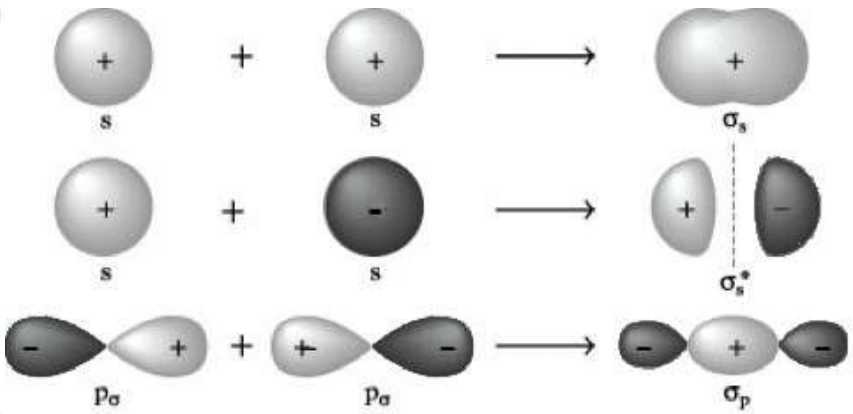
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H 2.20 *2.20* **2.30**																	He *5.50* **4.16**
Li 0.98 *0.97* **0.91**	Be 1.57 *1.47* **1.58**											B 2.04 *2.01* **2.05**	C 2.55 *2.50* **2.54**	N 3.04 *3.07* **3.07**	O 3.44 *3.50* **3.61**	F 3.98 *4.10* **4.19**	Ne *4.84* **4.79**
Na 0.93 *1.01* **0.87**	Mg 1.31 *1.23* **1.29**											Al 1.61 *1.47* **1.61**	Si 1.90 *1.74* **1.92**	P 2.19 *2.06* **2.25**	S 2.58 *2.44* **2.59**	Cl 3.16 *2.83* **2.87**	Ar *3.20* **3.24**
K 0.82 *0.91* **0.73**	Ca 1.00 *1.04* **1.03**	Sc 1.36 *1.20* **1.15**	Ti 1.54 *1.32* **1.25**	V 1.63 *1.45* **1.37**	Cr 1.66 *1.56* **1.45**	Mn 1.55 *1.60* **1.55**	Fe 1.83 *1.64* **1.67**	Co 1.88 *1.70* **1.76**	Ni 1.91 *1.75* **1.86**	Cu 1.90 *1.75* **1.83**	Zn 1.65 *1.66* **1.59**	Ga 1.81 *1.82* **1.76**	Ge 2.01 *2.02* **1.99**	As 2.18 *2.20* **2.21**	Se 2.55 *2.48* **2.42**	Br 2.96 *2.74* **2.69**	Kr 3.00 *2.94* **2.97**
Rb 0.82 *0.89* **0.71**	Sr 0.95 *0.99* **0.96**	Y 1.22 *1.11* **1.00**	Zr 1.33 *1.22* **1.11**	Nb 1.60 *1.23* **1.25**	Mo 2.16 *1.30* **1.39**	Tc 1.90 *1.36* **1.52**	Ru 2.20 *1.42* **1.66**	Rh 2.28 *1.45* **1.79**	Pd 2.20 1.35 **1.91**	Ag 1.93 *1.42* **1.98**	Cd 1.69 *1.46* **1.52**	In 1.78 *1.49* **1.66**	Sn 1.80 *1.72* **1.82**	Sb 2.05 *1.82* **1.98**	Te 2.10 *2.01* **2.16**	I 2.66 *2.21* **2.36**	Xe 2.60 *2.40* **2.58**
Cs 0.79 *0.86* **0.66**	Ba 0.89 *0.97* **0.88**	La 1.10 *1.08*	Hf 1.30 *1.23*	Ta 1.50 *1.33*	W 2.36 *1.40*	Re 1.90 *1.46*	Os 2.20 *1.52*	Ir 2.20 *1.55*	Pt 2.28 *1.44*	Au 2.54 *1.42*	Hg 2.00 *1.44*	Tl 2.04 *1.44*	Pb 1.87 *1.55*	Bi 2.02 *1.67*	Po 2.02 *1.76*	At 2.20 *1.90*	Rn *2.06*
Fr *0.86*	Ra *0.97*	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt									

Anordnung von Punkten/Liganden auf Kugeloberfläche



Kombinationen von Atomorbitalen zu Molekülorbitalen

σ-Bindung

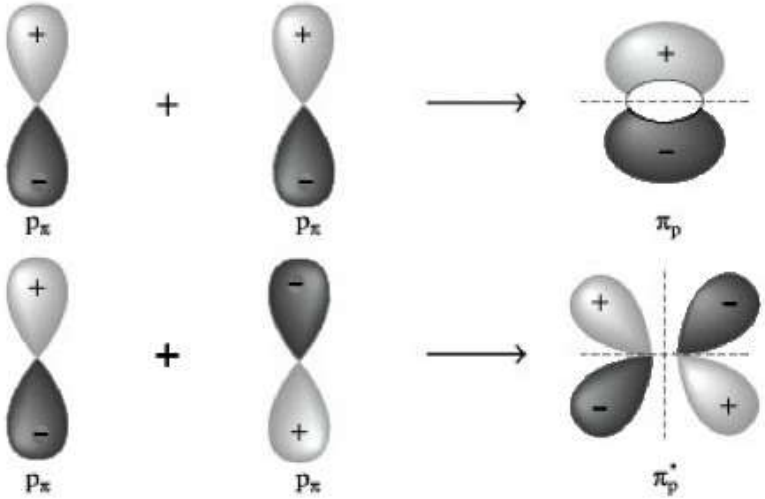


pos. Überlappung

neg. Überlappung

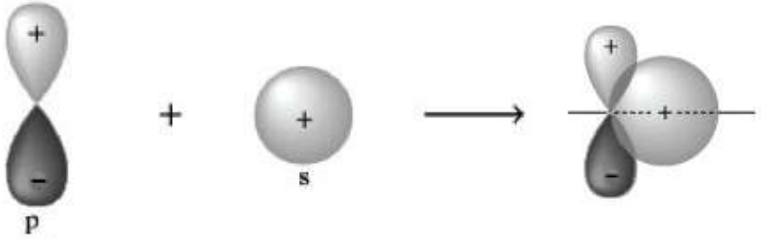
pos. Überlappung

π-Bindung



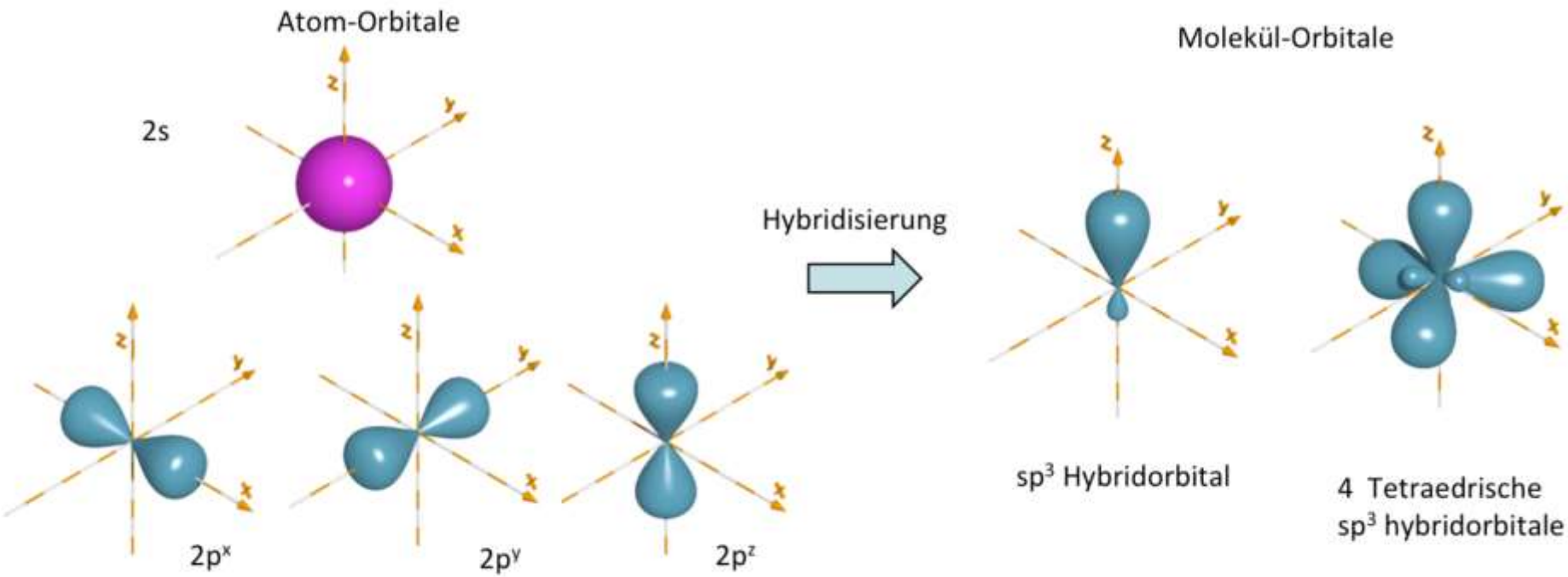
pos. Überlappung

neg. Überlappung



Überlappung aus Symmetriegründen Null (S = 0)

Bildung von sp^3 Hybridorbitalen

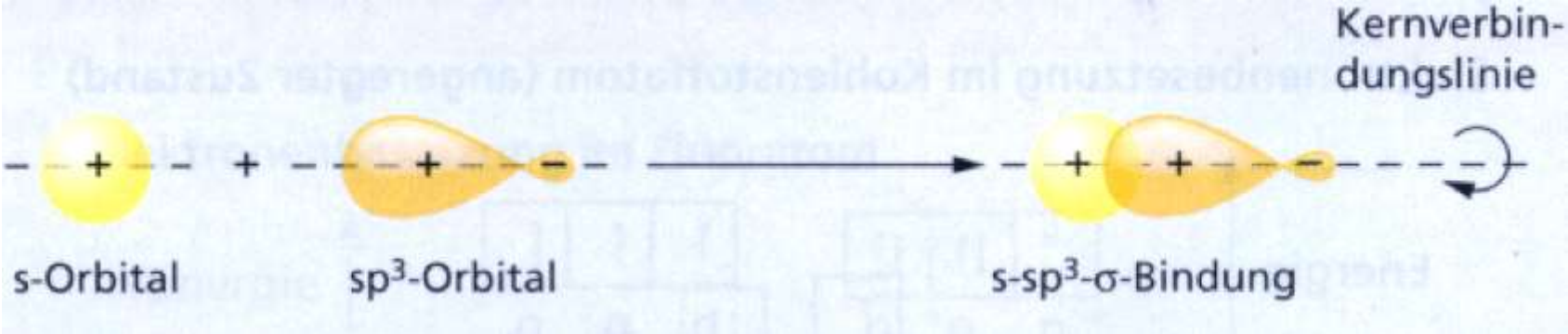


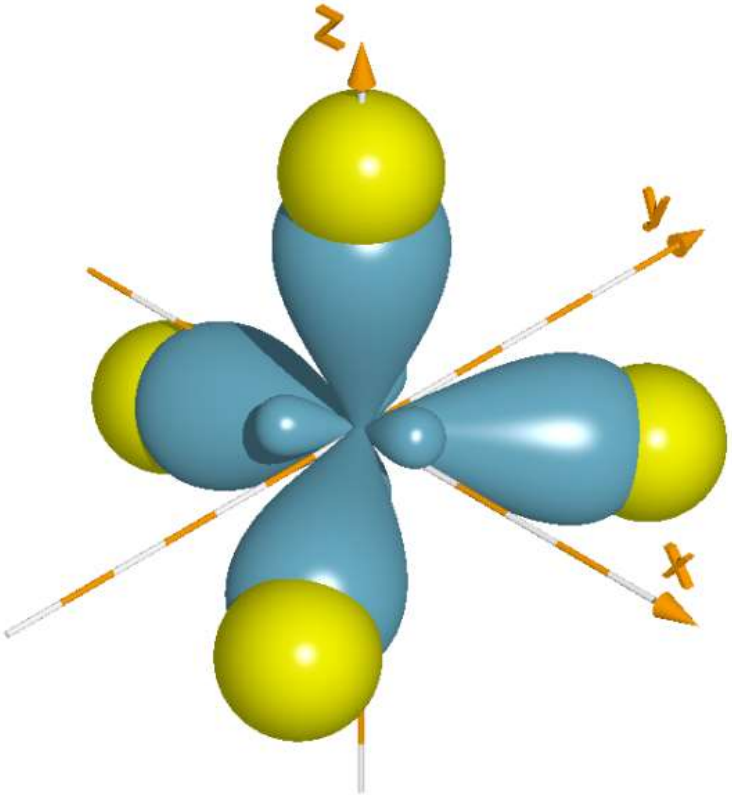
ein s-Orbital
und
drei p-Orbitale

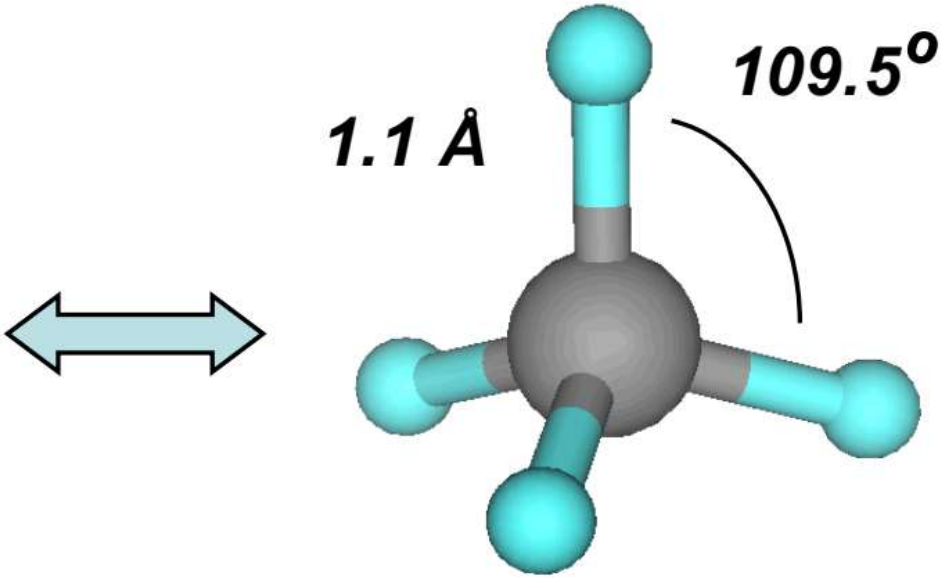
bilden

vier sp^3-Hybridorbitale

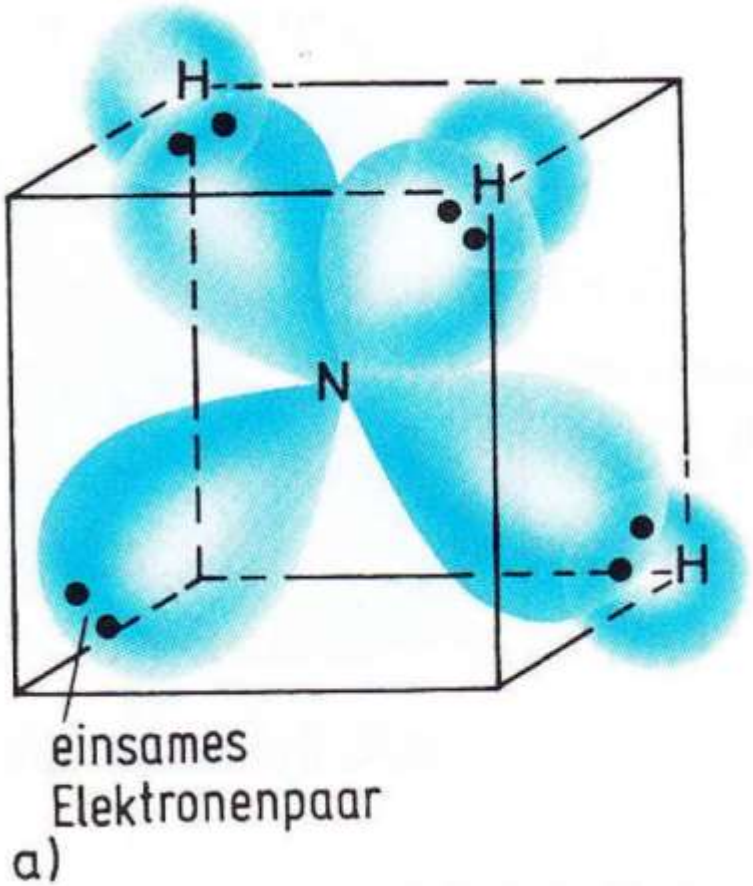
Räumliche Struktur des Methanmoleküls

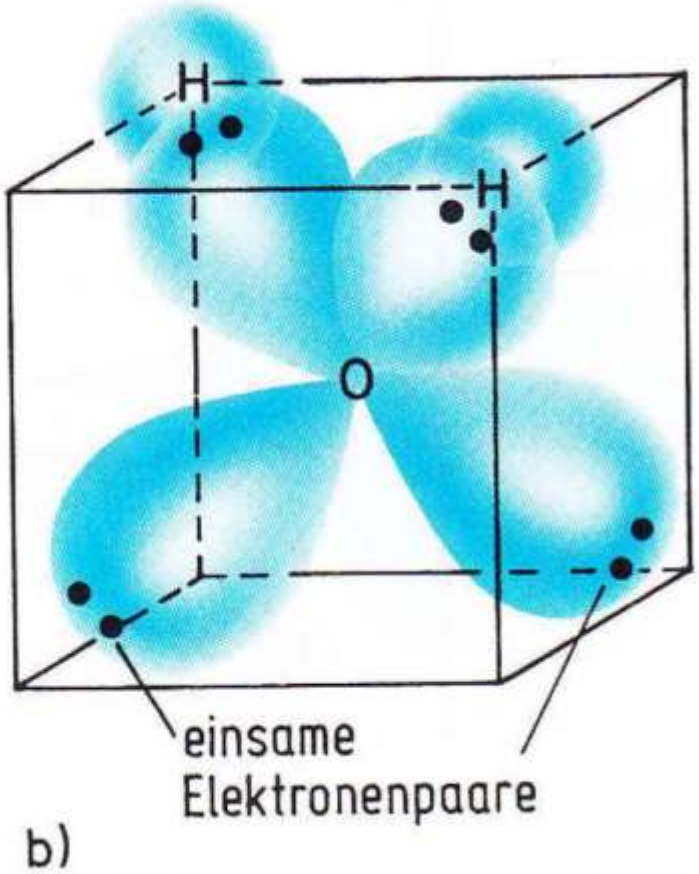






sp^3 Hybridorbitale in NH_3 und H_2O





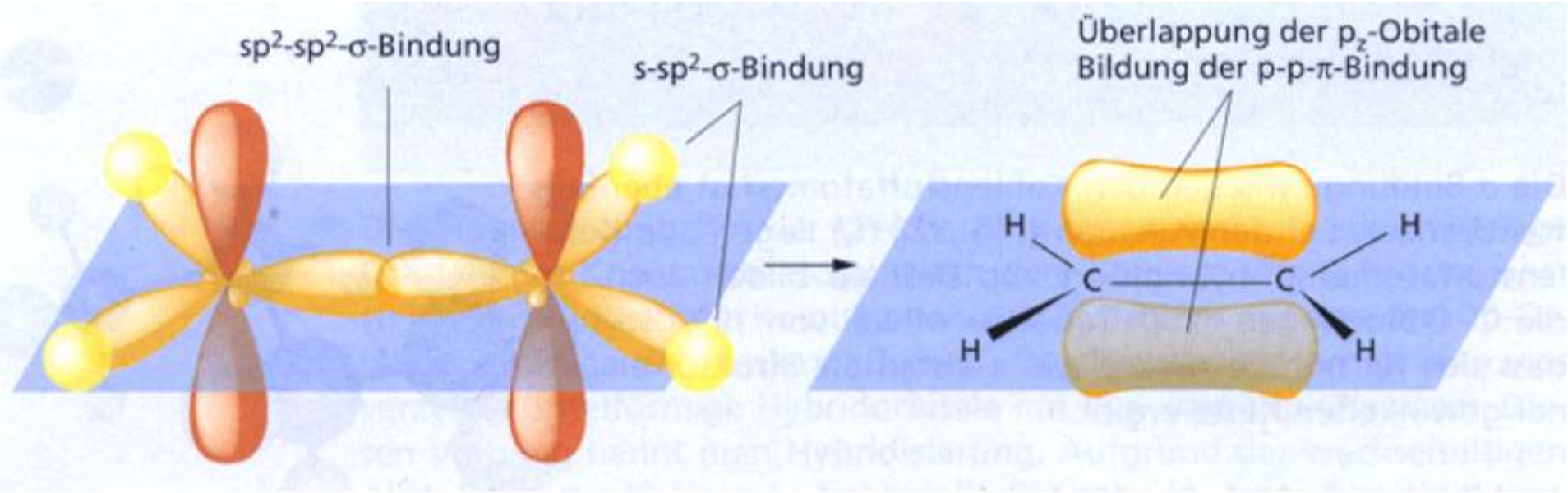
σ und π Bindungsenergien

σ and π bond energies of the p block elements kJ mol^{-1}

13	14	15	16	17
B–B σ 293	C–C σ 346 π 256	N–N σ 167 π 387	O–O σ 142 π 352	F–F σ 155
Al–Al σ 133	Si–Si σ 222 π 105	P–P σ 201 π 140	S–S σ 226 π 199	Cl–Cl σ 240
Ga–Ga σ 113	Ge–Ge σ 188 π 84	As–As σ 146 π 117	Se–Se σ 172 π 100	Br–Br σ 190
In–In σ 100	Sn–Sn σ 146	Sb–Sb σ 121 π 87	Te–Te σ 126 π 92	I–I σ 149

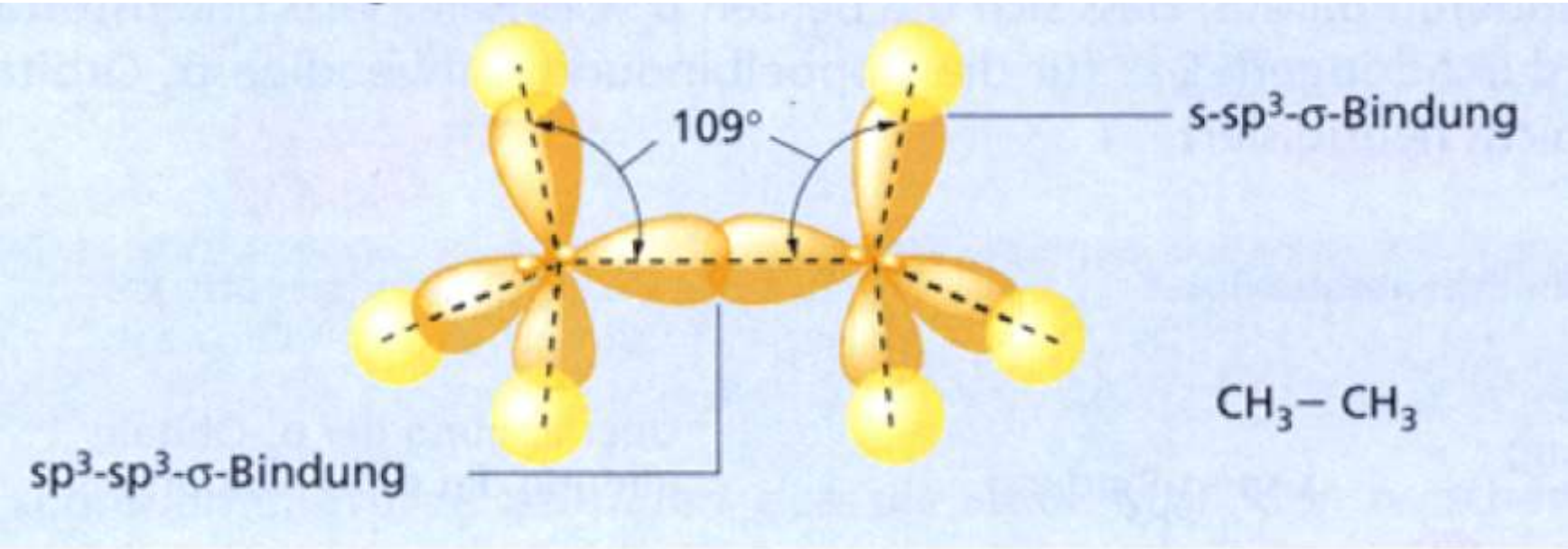
The particular values vary according to the methods and compounds used to calculate them.

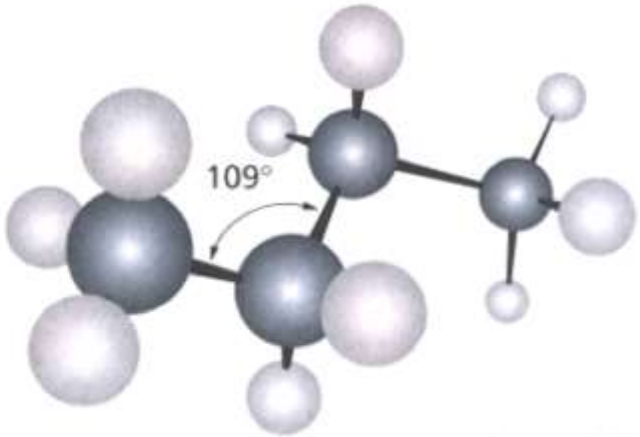
Bildung einer Doppelbindung in Ethenmolekül



Doppelbindungen zwischen zwei Kohlenstoffatomen entstehen aus einer **sp^2-sp^2-σ-Bindung** und einer **p-p-π-Bindung.**

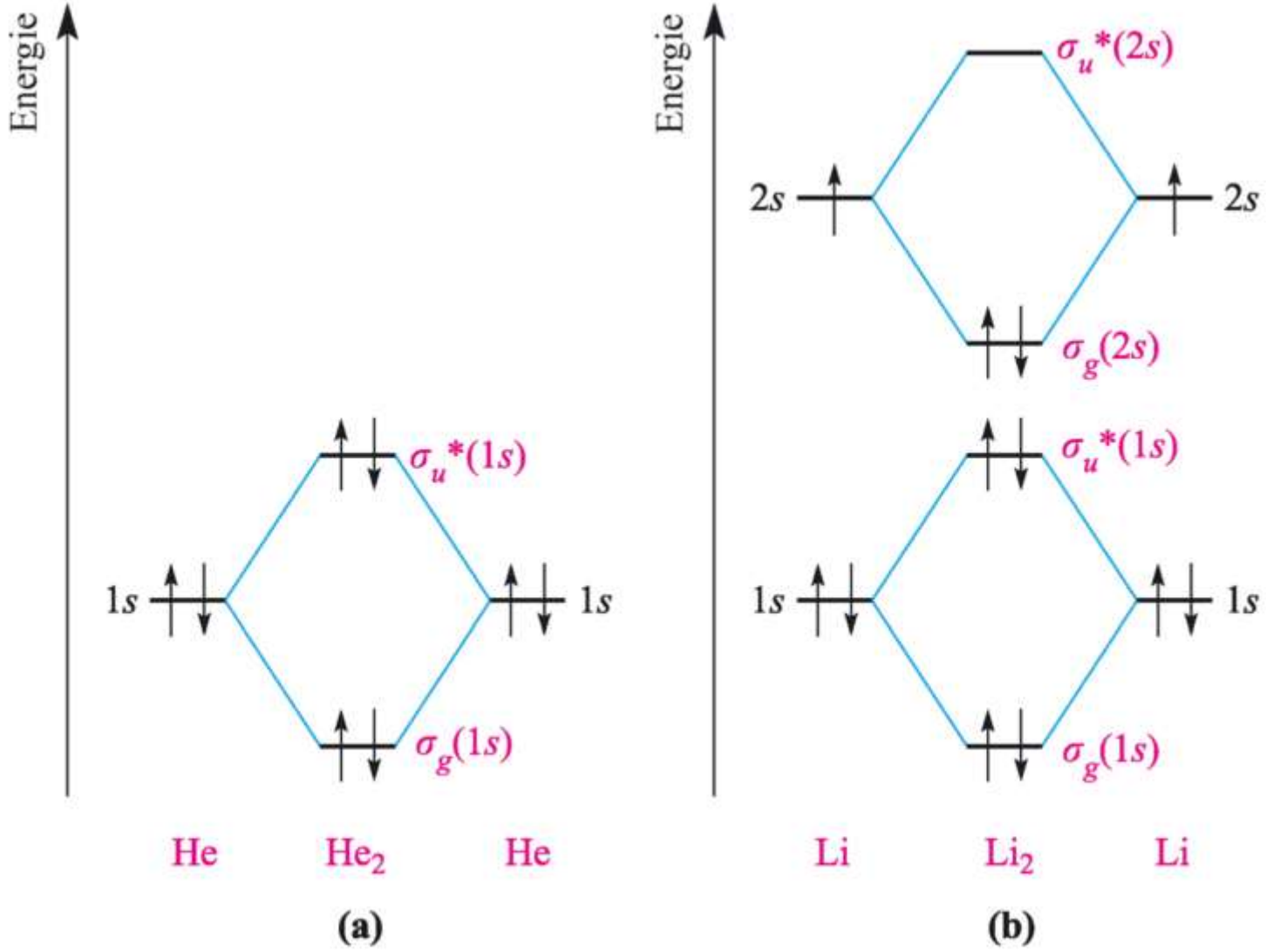
Orbitaldarstellung des Ethanmoleküls



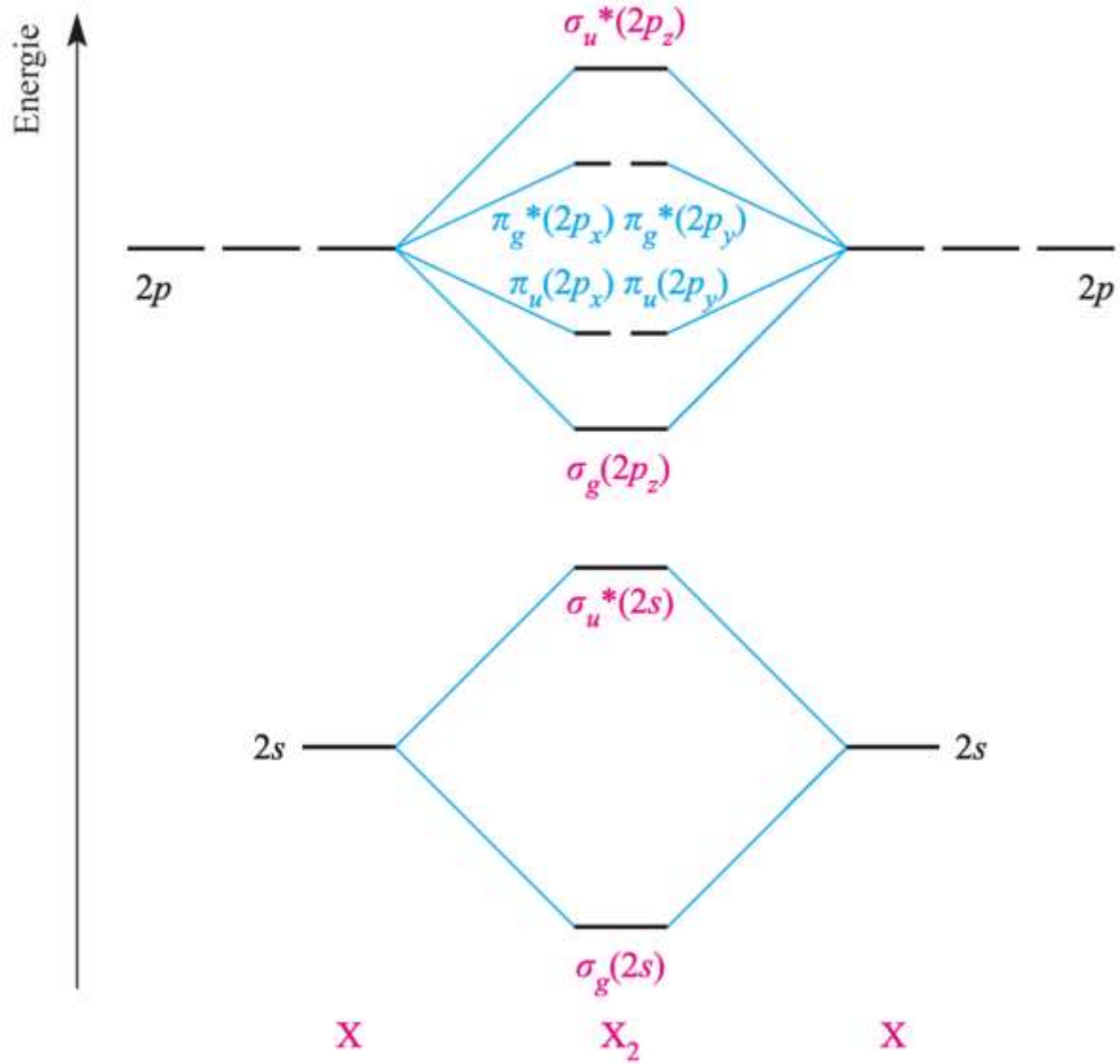


Kugel-Stab-Modell
von n-Butan

Orbitalwechselwirkungsdiagramme für He_2 und Li_2



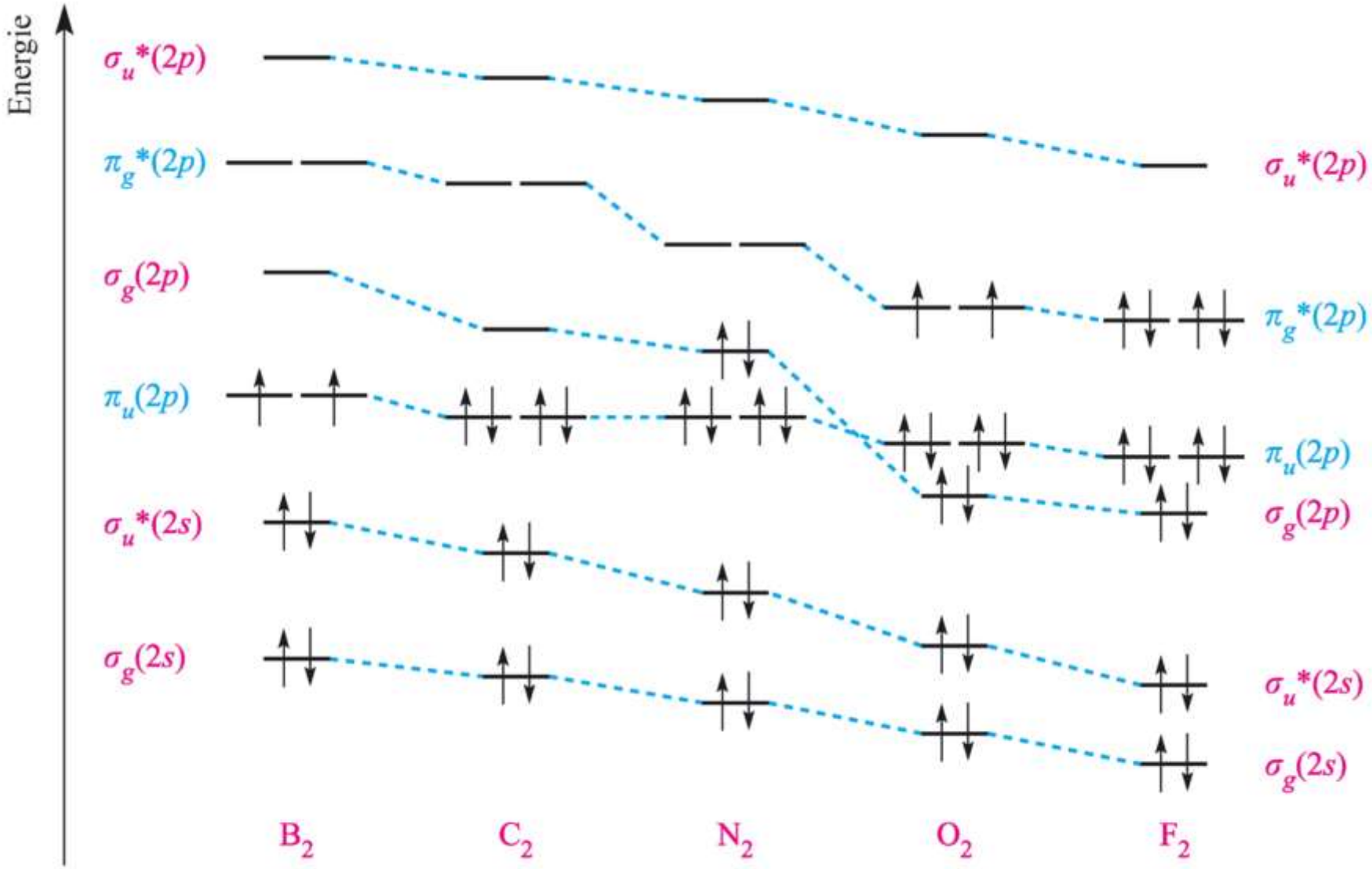
Orbitalwechselwirkungsdiagramm für die Bildung von X_2



Bindungseigenschaften einiger zweiatomiger Moleküle

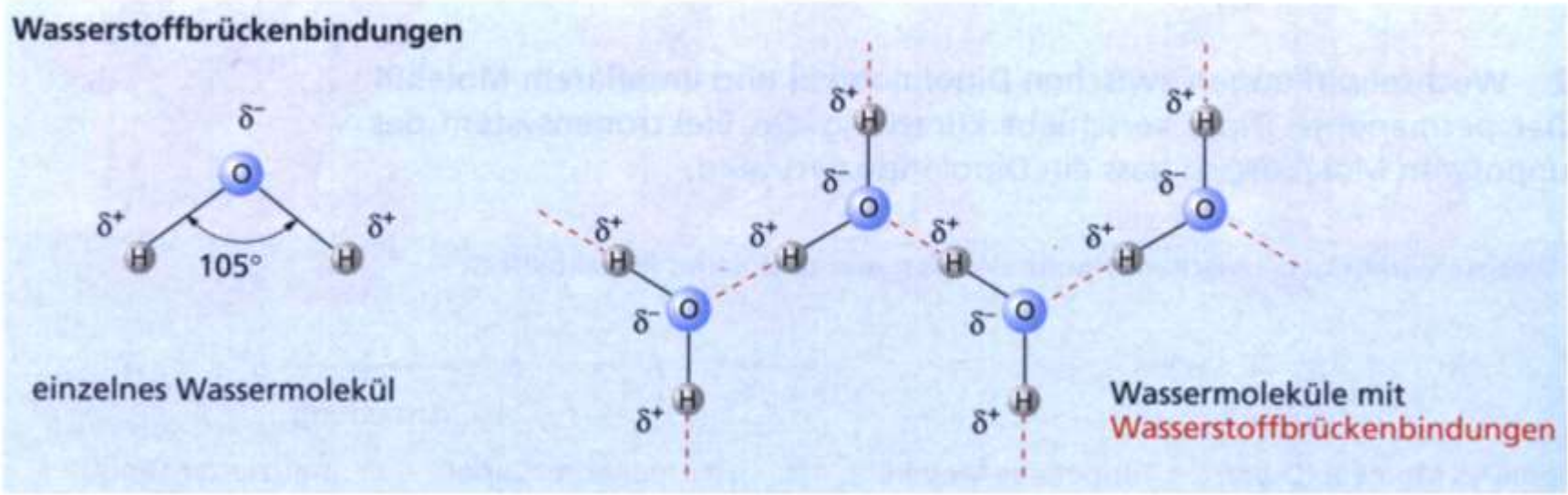
Molekül oder Ion	Anzahl der Valenz-elektronen	Bindungs-ordnung	Dissoziations-energie in kJ mol^{-1}	Kernabstand in pm
H_2^+	1	0,5	256	106
H_2	2	1	436	74
He_2^+	3	0,5	≈ 300	108
He_2	4	0	0	–
Li_2	2	1	110	267
Be_2	4	> 0*	10	245
B_2	6	1	297	159
C_2	8	2	610	131
N_2	10	3	945	110
O_2	12	2	498	121
F_2	14	1	159	142
Ne_2	16	0	0	–

Veränderungen der MO Energien zweiatomiger Moleküle

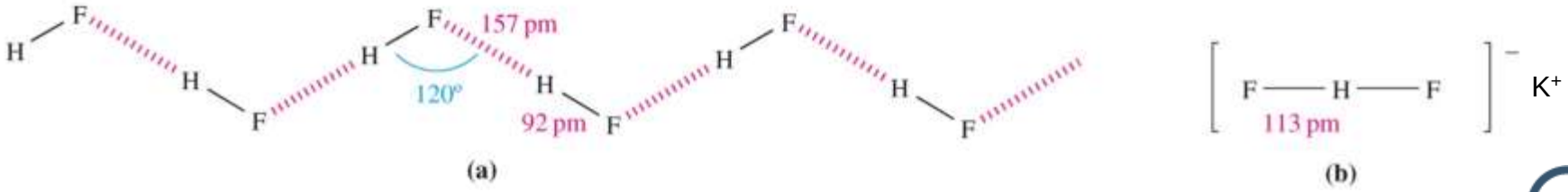


Wasserstoffbrückenbindungen

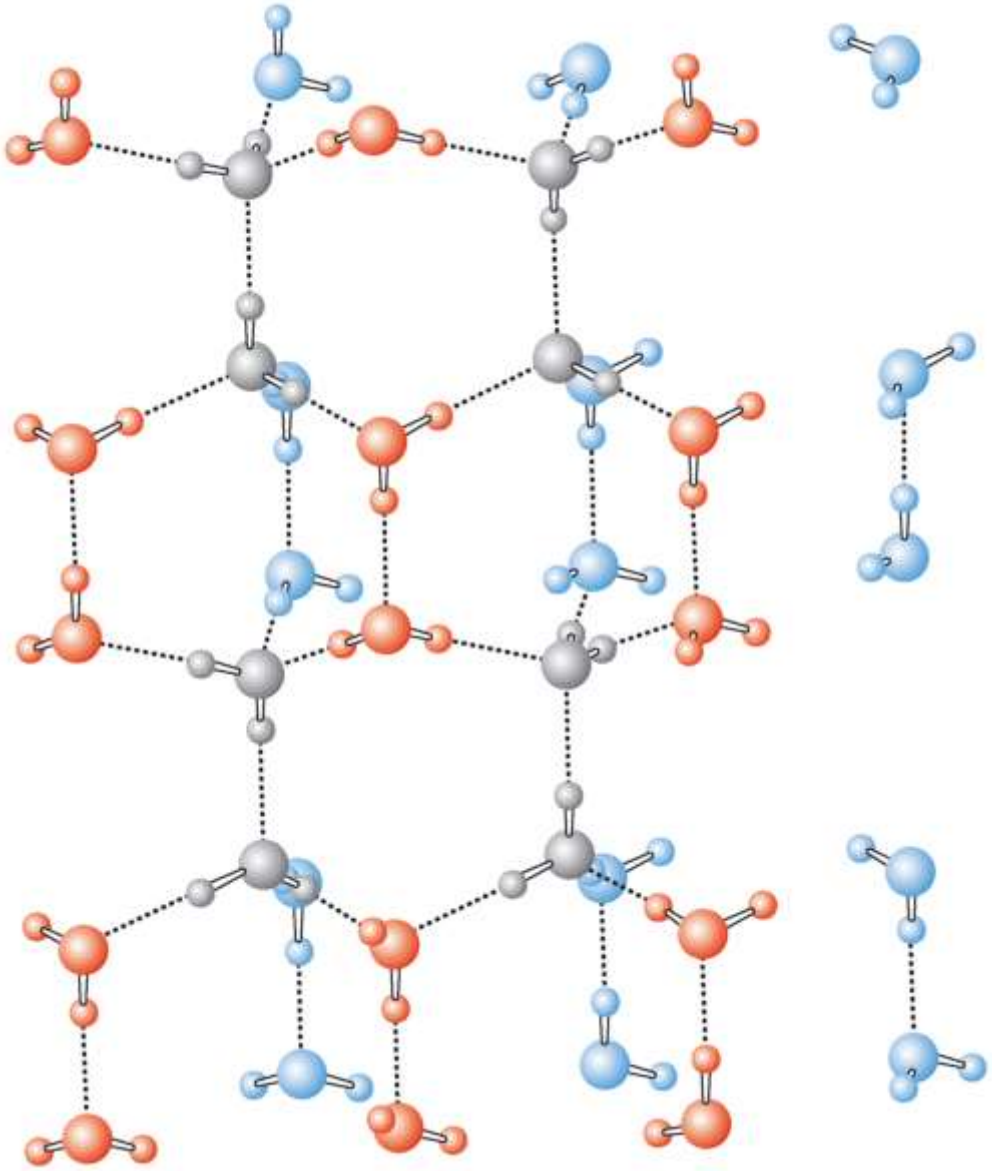
Die Grundlage der Wasserstoffbrückenbindung ist die starke Polarisierung kovalenter Element-Wasserstoffbindungen. Deshalb werden effektive Wasserstoffbrücken nur zu den elektronegativsten Elementen des PSE (N, O, F) gebildet.

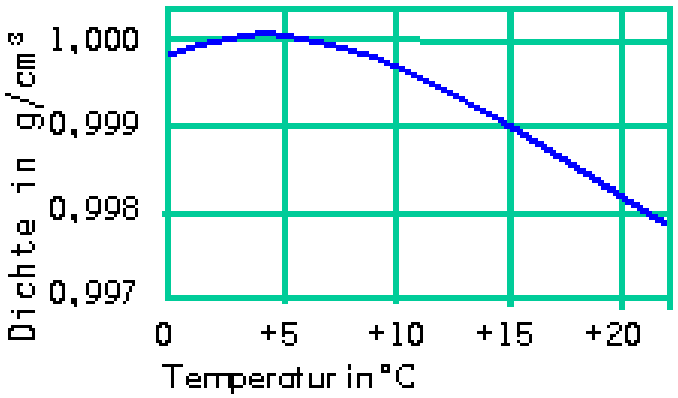


Festkörperstruktur von HF besteht aus Zickzack-Ketten.



Wasserstoffbrückenbindungen

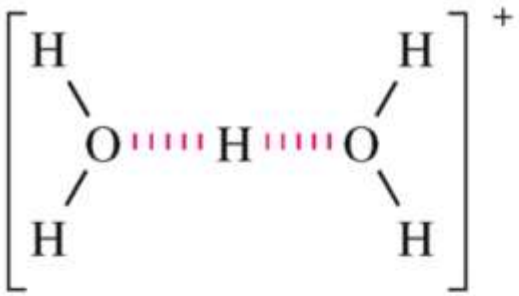




Änderung der Dichte des Wassers mit der Temperatur

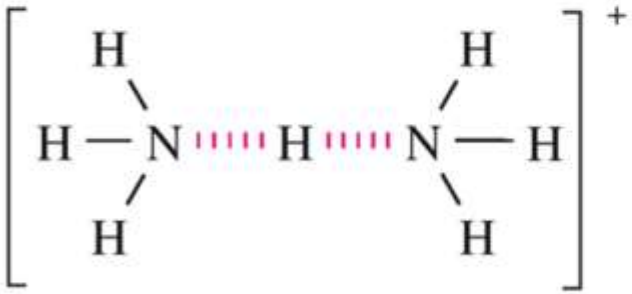
Wasser-Eis besteht aus einem dreidimensionalem Netzwerk von H_2O-Molekülen

Wasserstoffbrückenbindungen

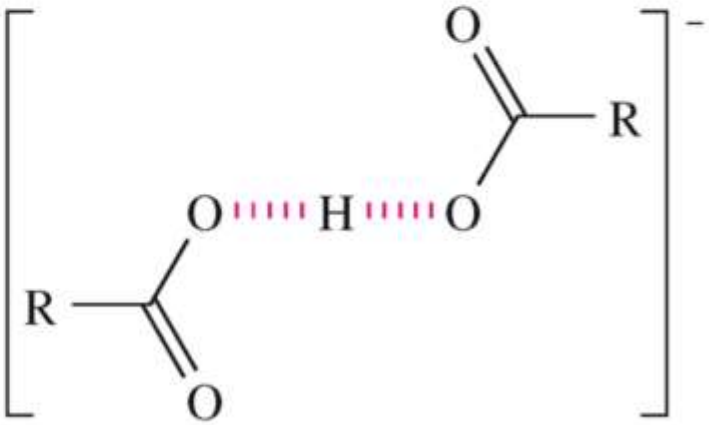


$[H_3O]^+ + H_2O$

$H_2O + [OH]^-$

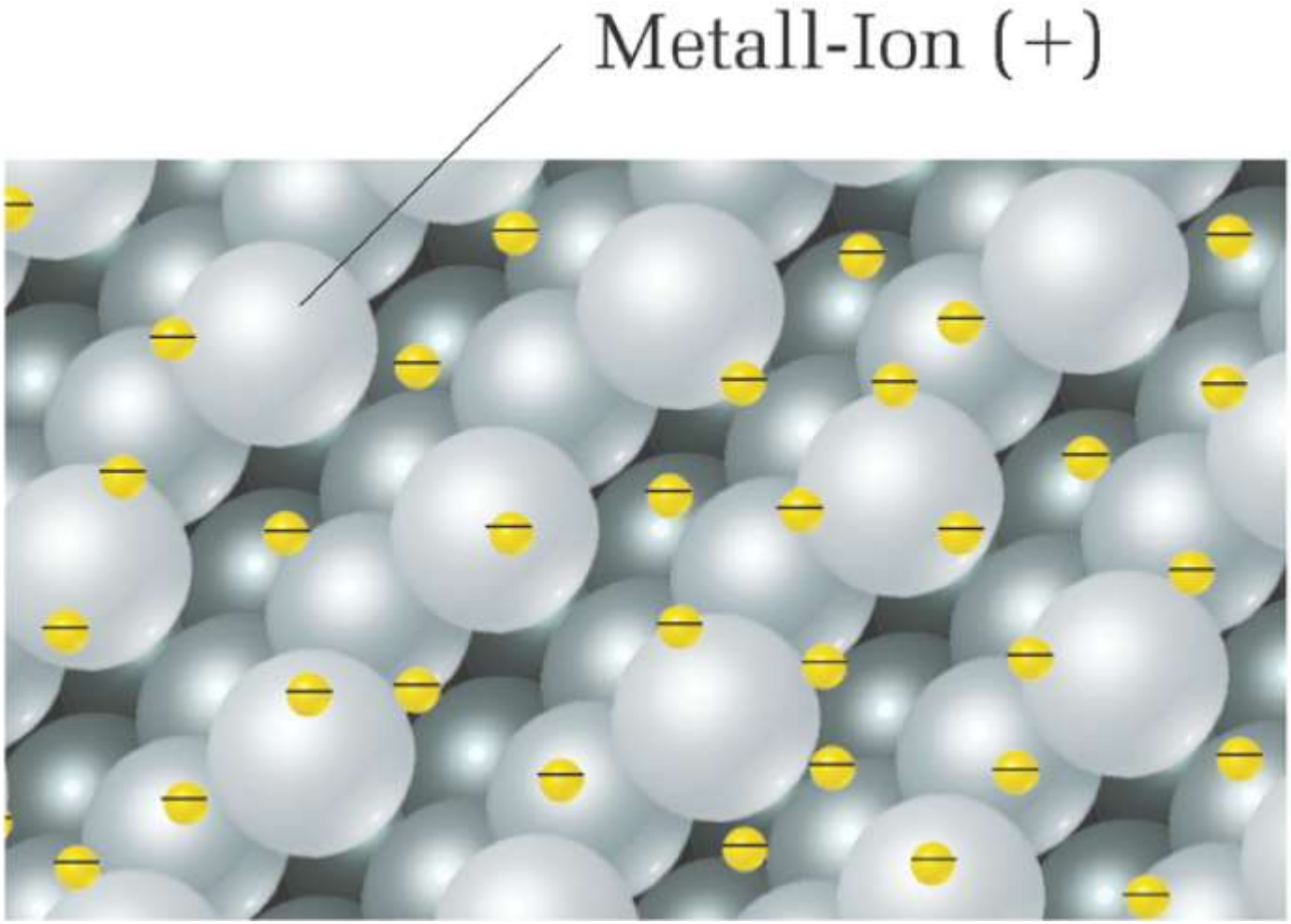


$[NH_4]^+ + NH_3$



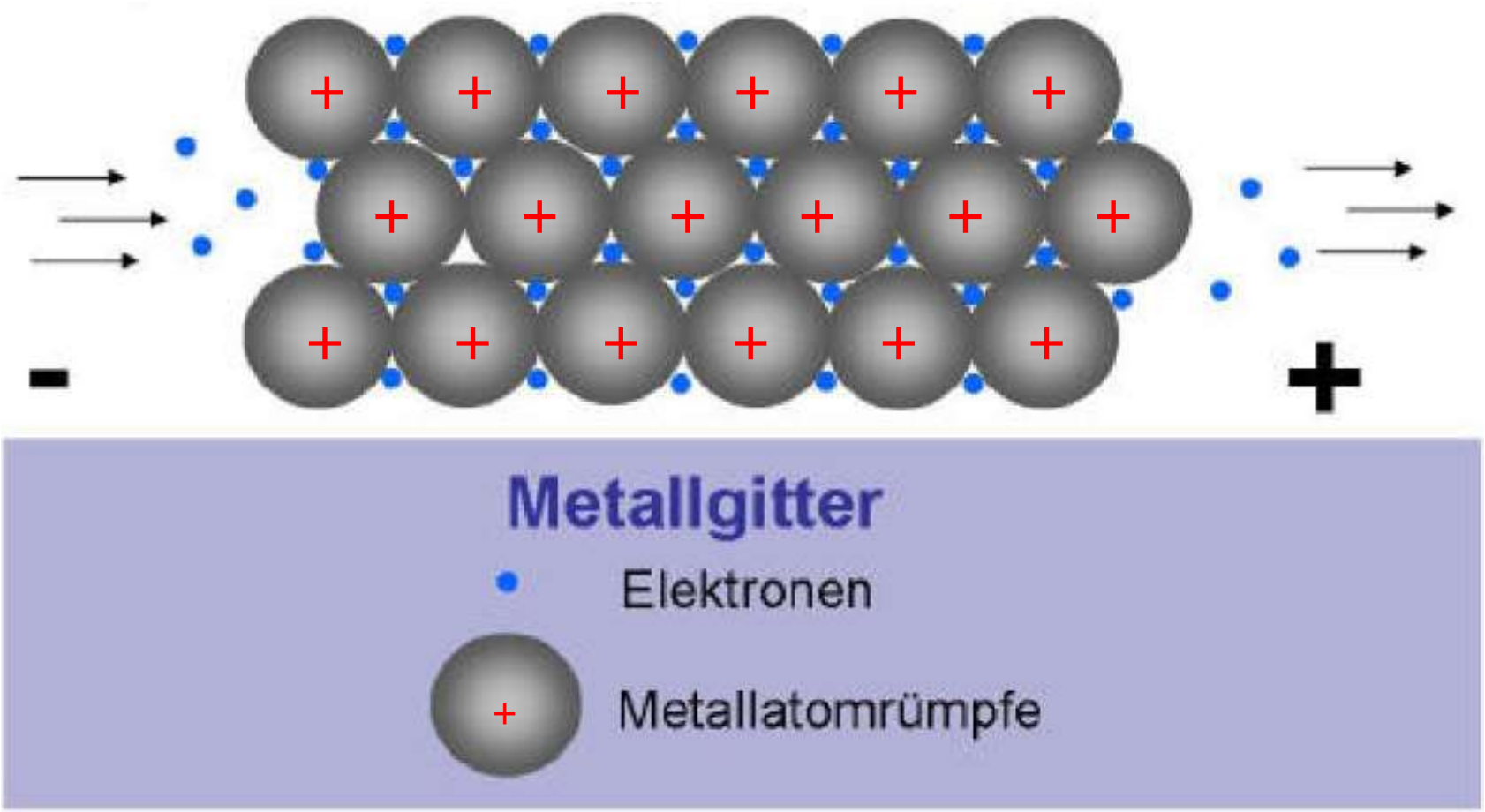
$RCO_2H + [RCO_2]^-$

Elektronengasmodell



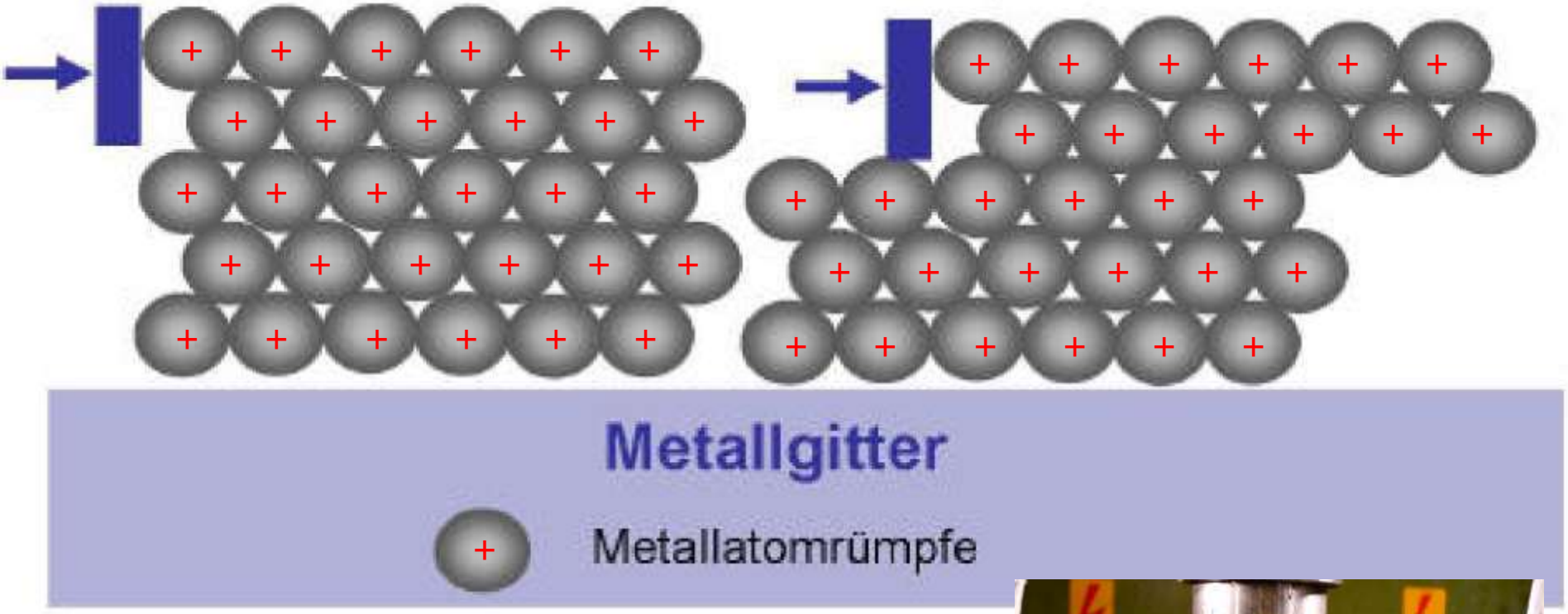
Schematische Darstellung des Elektronengasmodells der Elektronenstruktur von Metallen. Jede Kugel ist ein positiv geladenes Metall-Ion.

Elektronengasmodell



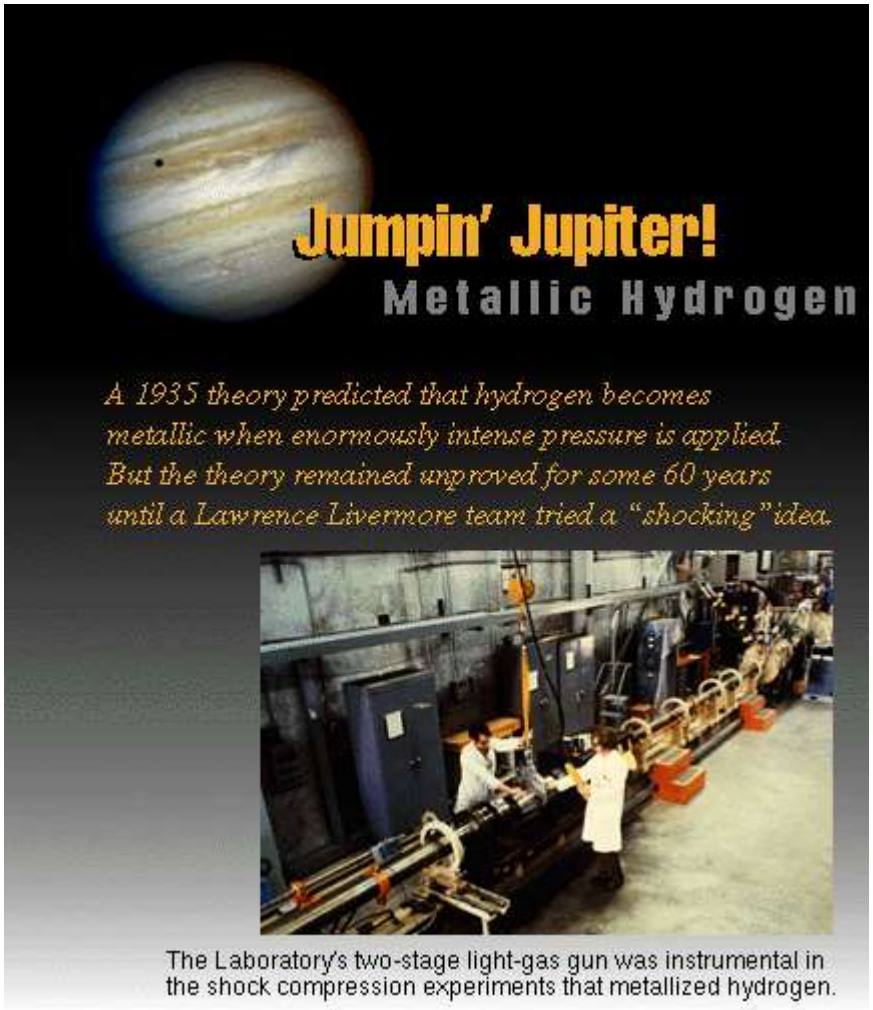
Beim Anlegen einer Spannung wandern die frei verschiebbaren Elektronen zum pos. Pol; der neg. Pol liefert Elektronen nach.

Elektronengasmodell



Die Gitterebenen lassen sich leicht gegeneinander verschieben, weil das Metallgitter aus lauter gleichen Bausteinen (pos. Ionen) besteht!

Metallischer Wasserstoff



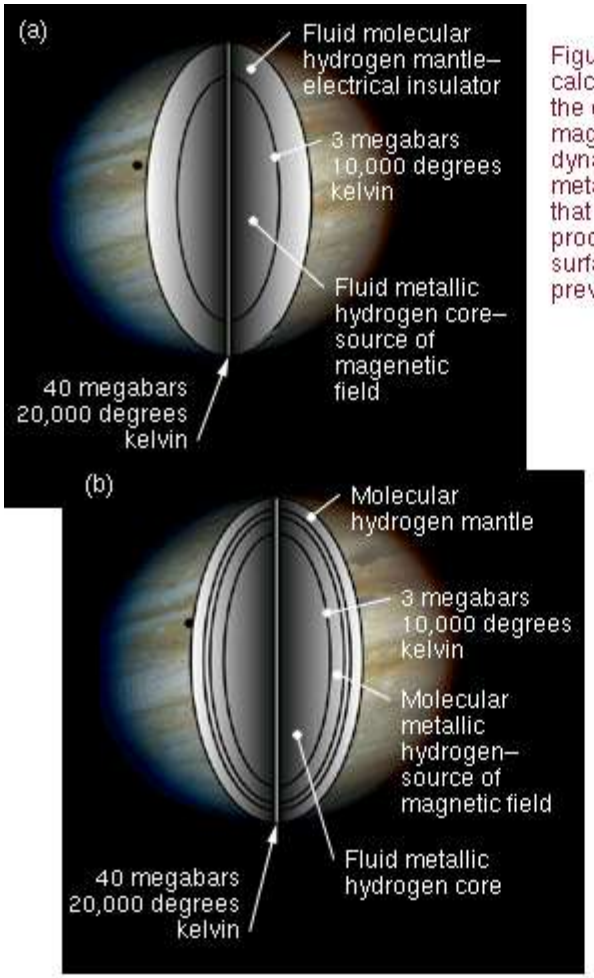
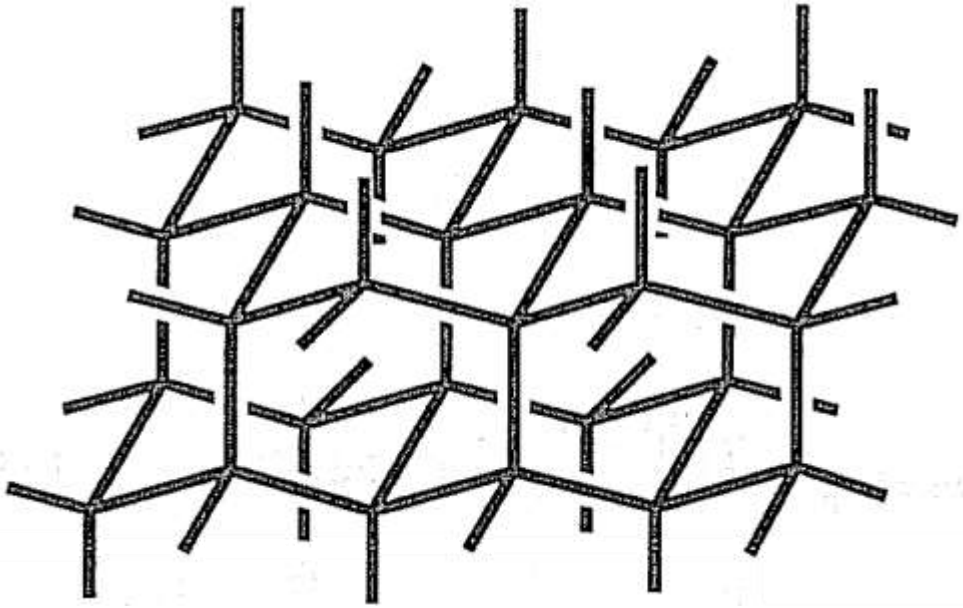


Figure 5. Our work has allowed us to calculate the electrical conductivity in the outer region of Jupiter. The planet's magnetic field is caused by convective dynamo motion of electrically conducting metallic hydrogen. Our results indicate that in Jupiter, the magnetic field is produced much closer to the planet's surface (b) than was thought previously (a).

https://str.llnl.gov/str/Nellis.html

Gruppe 14 Elemente: C, Si, Ge, Sn, Pb

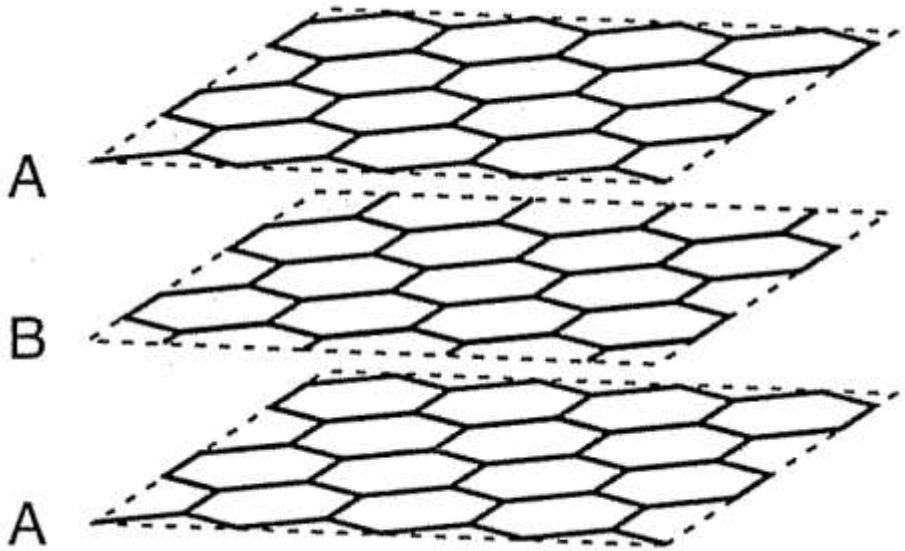


Die Struktur von Kohlenstoff (Diamant), Silizium, Germanium und α-Zinn.

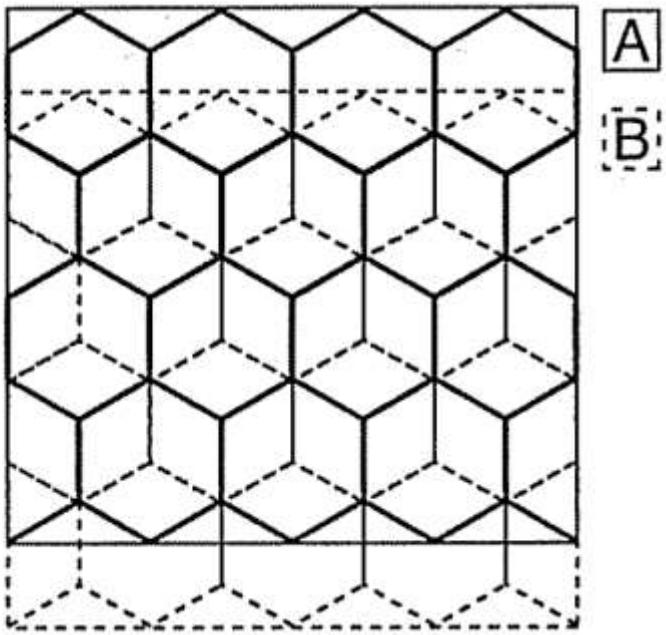
Nur die Bindungslängen unterscheiden sich:

C-C (154 pm)	Si-Si (235 pm)
Ge-Ge (245 pm)	Sn-Sn (281 pm)

Struktur von Graphit

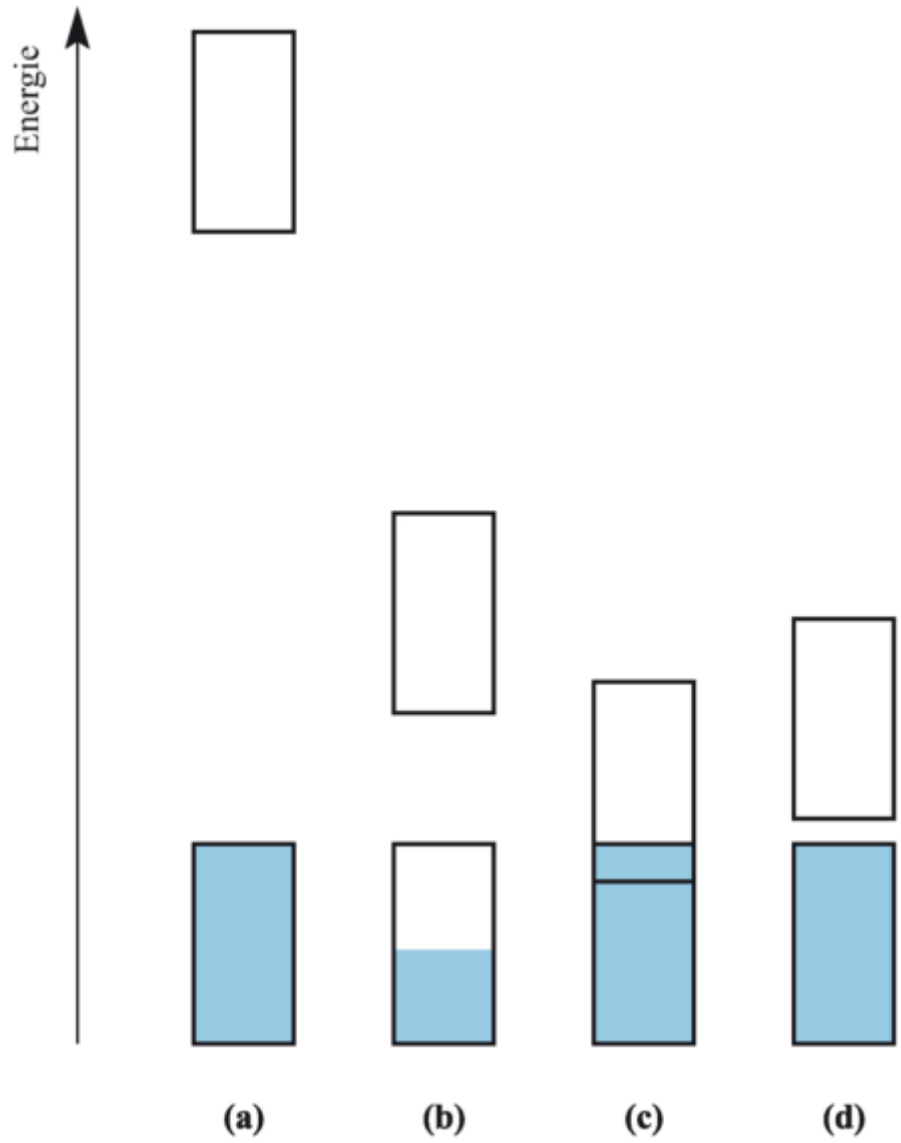


Schichtstuktur von Graphit



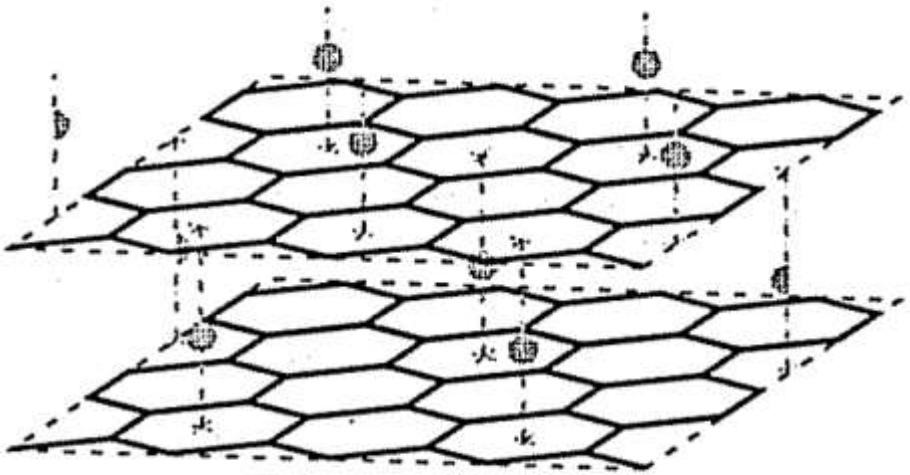
Sicht von oben zeigt, wie die Schichten gestapelt sind

Bandtrukturen von Metallen, Leitern und Nichtleitern

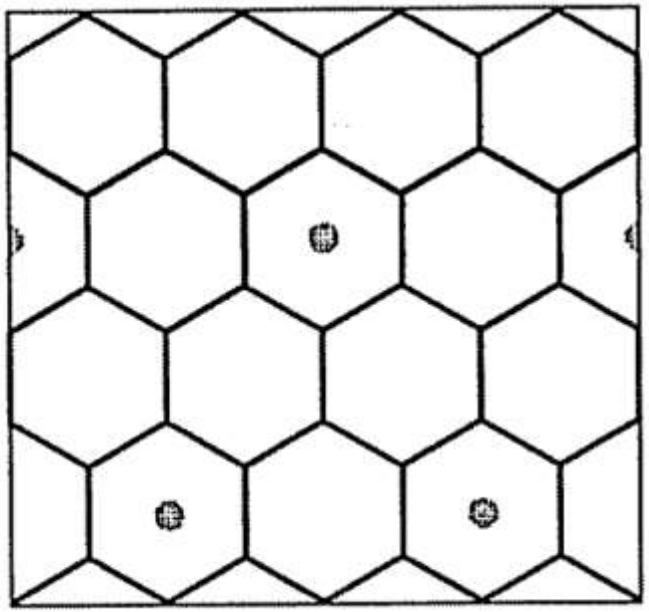


Die relativen Energien besetzter und unbesetzter Bänder
(a) eines Nichtleiters,
(b) eines Metalls mit nur *teilweise* besetztem unterem Band,
(c) eines Metalls mit überlappendem besetztem und unbesetztem Band, und
(d) eines Halbleiters.

Dotierung von Graphit – Struktur von C_8K



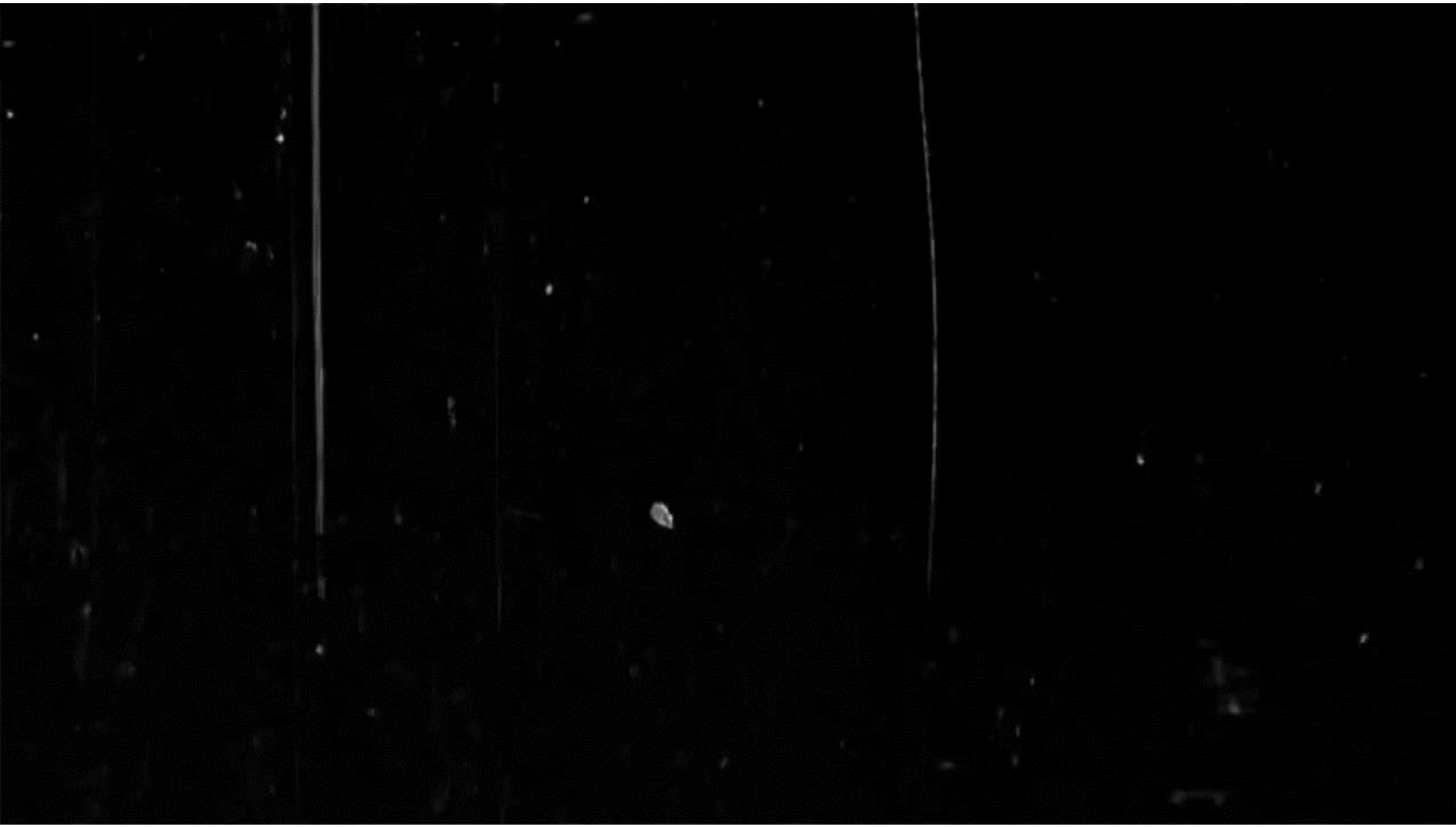
Struktur von C_8K



Sicht von oben

Widerstände in einigen Feststoffen

		Spez. Widerstand / Ω m
Diamant		
Graphit	in der C-C Schicht	
	senkrecht zur C-C Schicht	
C_8K	in der C-C Schicht	
	senkrecht zur C-C Schicht	
C_8Br		
typisches Metall (Nickel)		



The Molecular Shape of You (Ed Sheeran Parody) | A Capella Science

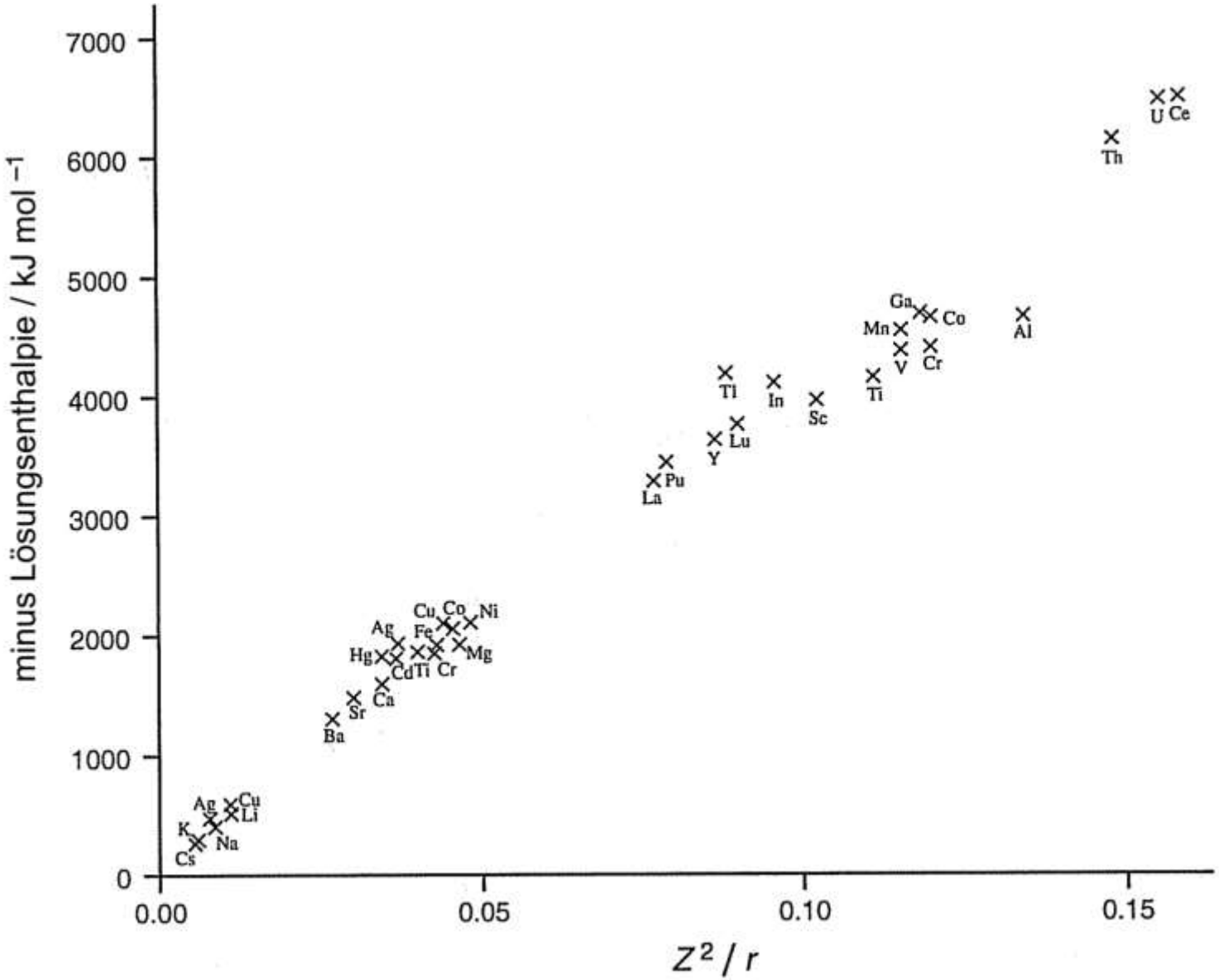
4,284,890 views

180K

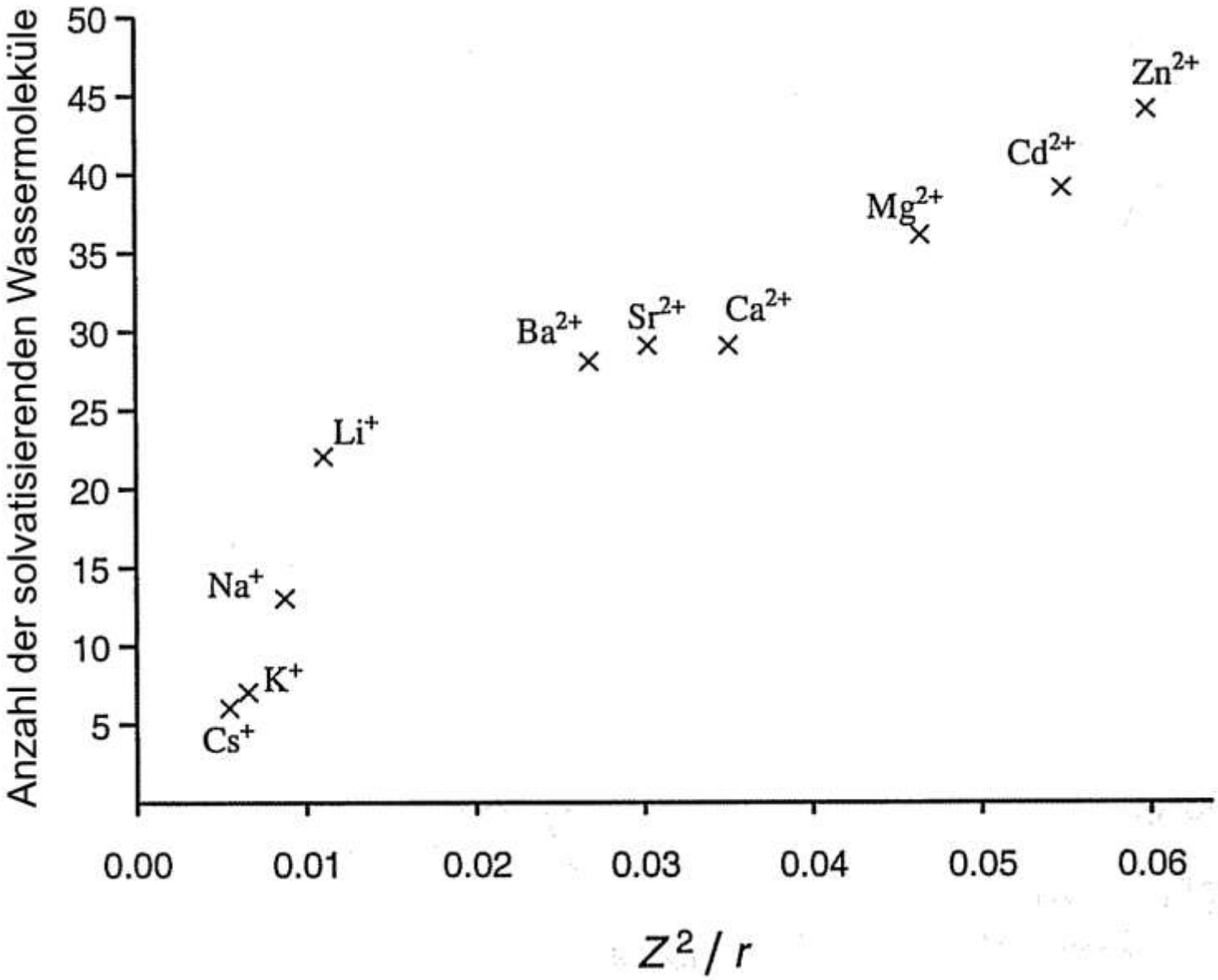
acapellascience

Published on 9 Jun 2017

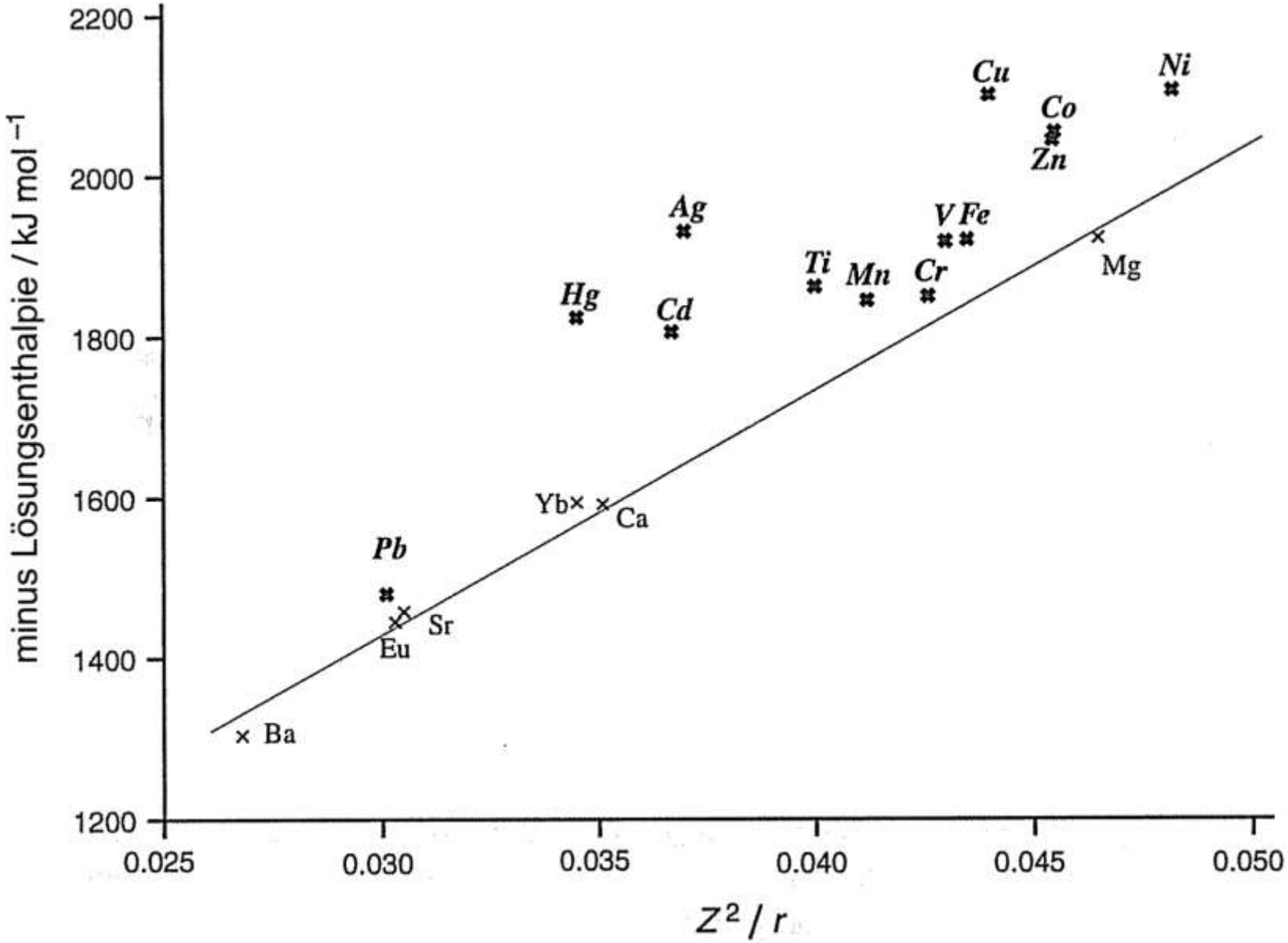
Lösungsenthalpien und Ladung



Solvatisierung



Lösungsenthalpien und Orbitalenergien



Amphoterie

Ampholyte sind Verbindungen, die sowohl als Säuren (Protonendonator) aber auch als Basen (Protonenakzeptor) reagieren können. Sie werden auch als **amphotere Verbindungen** bezeichnet.

korrespond. Base	Ampholyt	korrespond. Säure
OH^-	H_2O	H_3O^+
NH_2^-	NH_3	NH_4^+
CO_3^{2-}	HCO_3^-	H_2CO_3
PO_4^{3-}	HPO_4^{2-}	$H_2PO_4^-$

Neutralisation

Die **Neutralisationsreaktion** ist ein Sonderfall der Säure-Base-Reaktion. Es reagieren Hydronium-Ionen mit Hydroxid-Ionen zu Wasser.

$$H_3O^+ \text{ (Säure)} + OH^- \text{ (Base)} \rightleftharpoons 2H_2O \text{ (Wasser)}$$

Säuren und Metallhydroxide (Basen, Laugen) reagieren miteinander unter Bildung von Wasser. Diese chemische Reaktion wird **Neutralisation** genannt (↗ S. 121), weil sich aus Hydronium-Ionen und Hydroxid-Ionen Wasser bildet. Es handelt sich um eine Reaktion mit Protonenübergang.

Reaktion von Salpetersäure mit Natriumhydroxidlösung

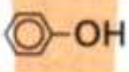
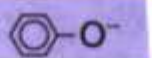
$$\underbrace{H_3O^+ + NO_3^-}_{HNO_3} + \underbrace{Na^+ + OH^-}_{NaOH} \longrightarrow 2\,H_2O + \underbrace{Na^+ + NO_3^-}_{NaNO_3}$$

$\Delta H° = -57$ kJ/mol

pK_S-Werte einiger Säure-Base-Paare bei 25 °C (pK_S = - lg K_S)

	Säure	Base	pK_S	
	$HClO_4$	ClO_4^-	−10	
	HCl	Cl^-	− 7	
	H_2SO_4	HSO_4^-	− 3,0	
	H_3O^+	H_2O	− 1,74	
	HNO_3	NO_3^-	− 1,37	
Stärke	HSO_4^-	SO_4^{2-}	+ 1,96	
der Säure	H_2SO_3	HSO_3^-	+ 1,90	
nimmt zu	H_3PO_4	$H_2PO_4^-$	+ 2,16	
	$[Fe(H_2O)_6]^{3+}$	$[Fe(OH)(H_2O)_5]^{2+}$	+ 2,46	
↑	HF	F^-	+ 3,18	↓
	CH_3COOH	CH_3COO^-	+ 4,75	
	$[Al(H_2O)_6]^{3+}$	$[Al(OH)(H_2O)_5]^{2+}$	+ 4,97	Stärke
	$CO_2 + H_2O$	HCO_3^-	+ 6,35	der Base
	$[Fe(H_2O)_6]^{2+}$	$[Fe(H_2O)_5OH]^+$	+ 6,74	nimmt zu
	H_2S	HS^-	+ 6,99	
	HSO_3^-	SO_3^{2-}	+ 7,20	
	$H_2PO_4^-$	HPO_4^{2-}	+ 7,21	
	$[Zn(H_2O)_6]^{2+}$	$[Zn(H_2O)_5OH]^+$	+ 8,96	
	HCN	CN^-	+ 9,21	
	NH_4^+	NH_3	+ 9,25	
	HCO_3^-	CO_3^{2-}	+10,33	
	H_2O_2	HO_2^-	+11,65	
	HPO_4^{2-}	PO_4^{3-}	+12,32	
	HS^-	S^{2-}	+12,89	
	H_2O	OH^-	+15,74	
	OH^-	O^{2-}	+29	

pK_S-Werte und pK_B-Werte

Säurekonstanten ausgewählter Säuren in wässriger Lösung bei 25 °C				
Säure	HA	pK_S	A^-	pK_B
Salzsäure	HCl	≈–7	Cl^-	≈21
Schwefelsäure	H_2SO_4	≈–3	HSO_4^-	≈17
Hydrogensulfat	HSO_4^-	1,92	SO_4^{2-}	12,08
Phosphorsäure	H_3PO_4	2,13	$H_2PO_4^-$	11,87
Schwefelwasserstoff	H_2S	6,92	HS^-	7,08
Essigsäure	CH_3COOH	4,75	CH_3COO^-	9,25
Kohlensäure	H_2CO_3	6,52	HCO_3^-	7,48
Ammonium-Ion	NH_4^+	9,25	NH_3	4,75
Phenol		9,98		4,02
Hydrogencarbonat	HCO_3^-	10,40	CO_3^{2-}	3,60
Hydrogenphosphat	HPO_4^{2-}	12,32	PO_4^{3-}	1,68
	abnehmende Säurestärke		zunehmende Basenstärke	