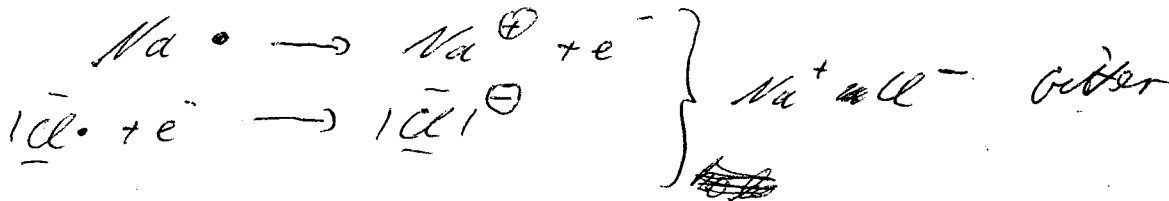


# Tonenbindung

~ 90%

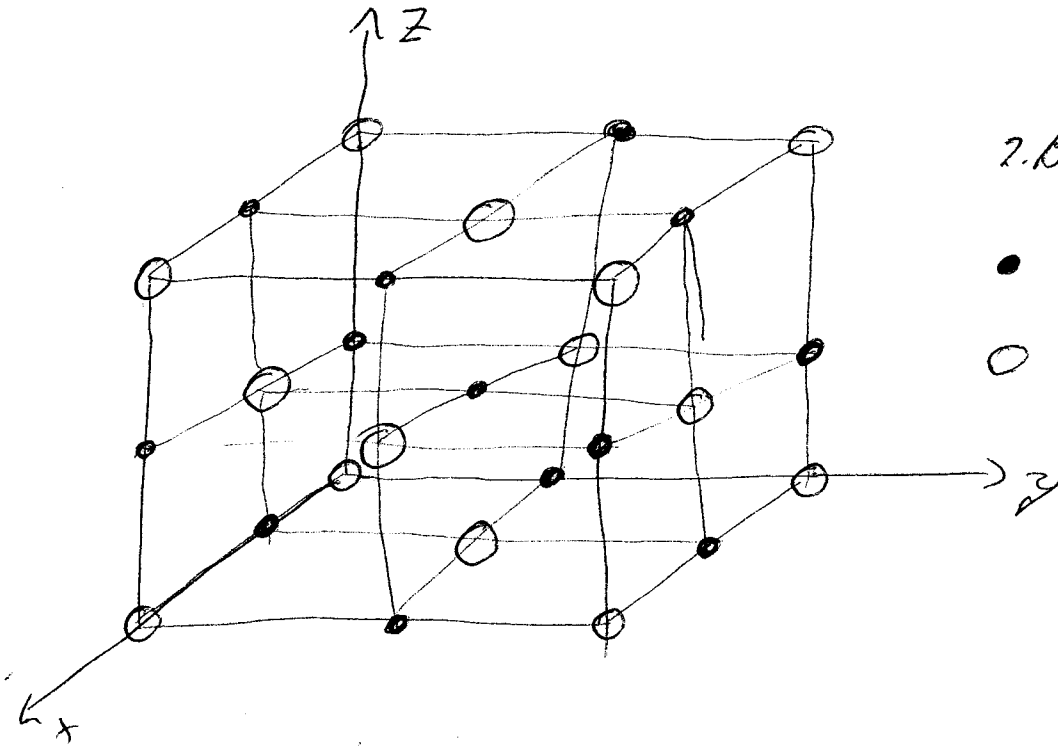
- Metallion-Phänomen ( $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$ )<sub>H</sub>
- exothermer Vorgang

z.B. NaCl (Steinsalz / Kochsalz)



$\text{Na}^+ \text{Cl}^-$

Elementarzelle



3 dem  $\alpha$  Translation  $\rightarrow$  Kristall

$\text{RZ} = 6$

Koordinations-Polyeder  $\equiv$  Oktaeder

Bindungskraft  $\rightarrow$  Coulombkraft

$$F = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_0^2}{r^2} z_+ z_-$$

$z =$  Ladungszahl (Kation / Anion)

$e_0 =$  Elementarladung

$r_{+/-} =$  Abstand Kation / Anion

$\epsilon_0 =$  el. Feldkonstante

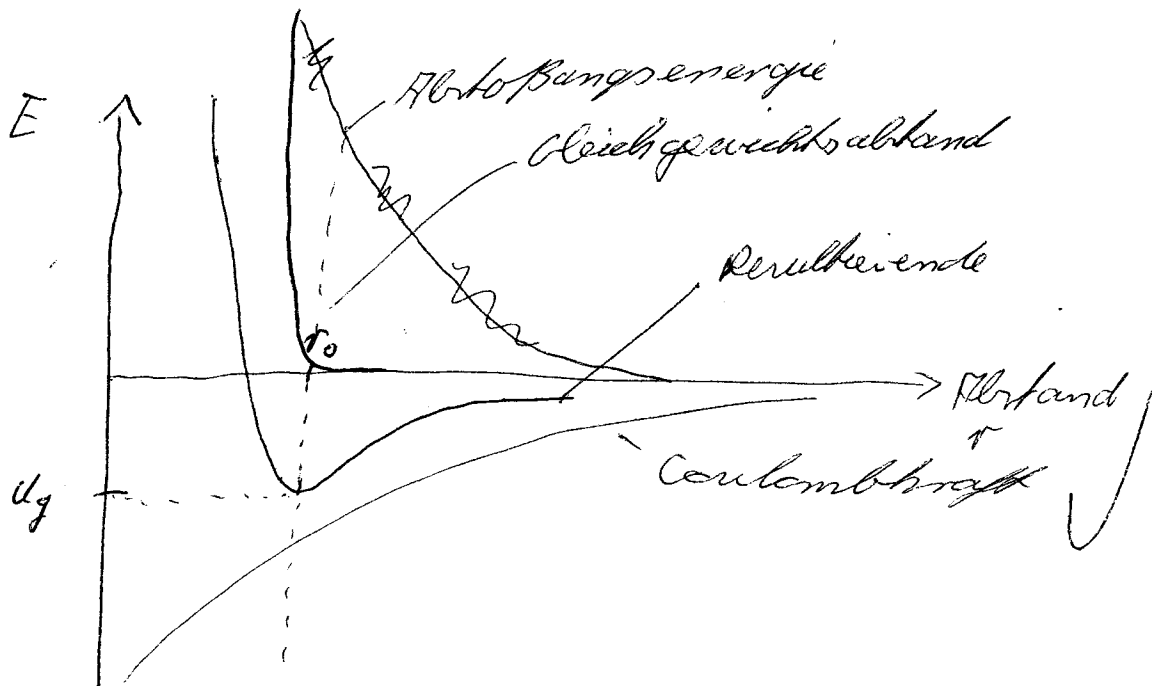
Gitterenergie für 1 Mol

$$U_g = \frac{e_0^2 \cdot z_+ \cdot z_- \cdot N_A \cdot M_L}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^2} \cdot \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

$n =$  empirischer Faktor  $\approx$  Bornsche Abstoßung

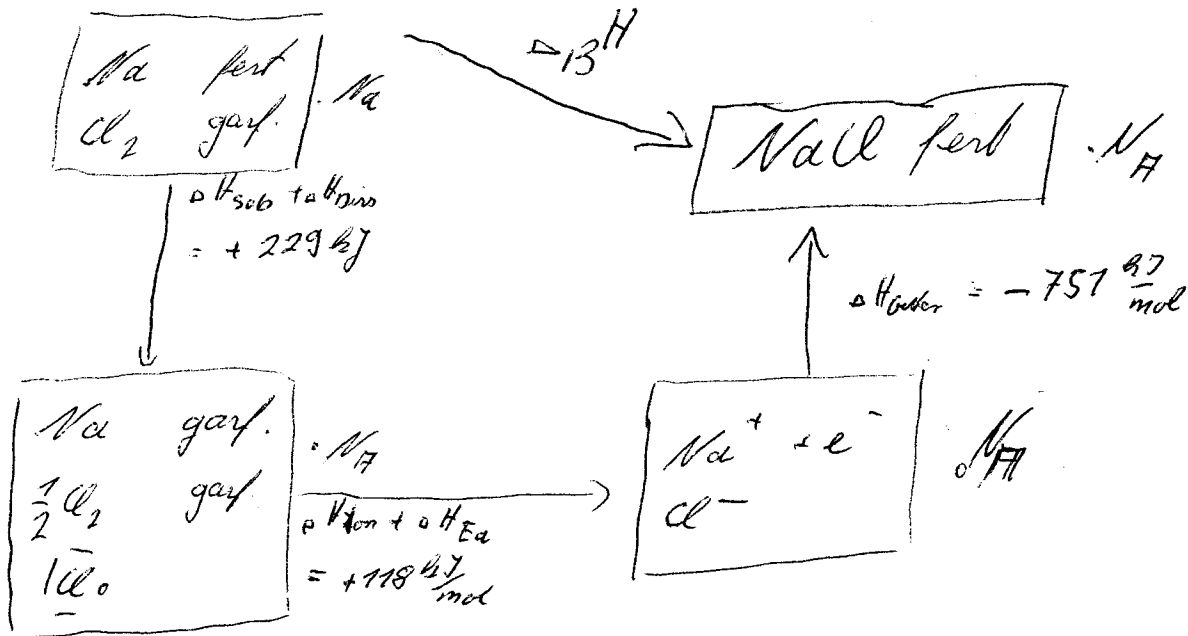
$M_L =$  Madelung-Faktor  $= 1,7476$

$E =$  Bindungsenthalpie  $\Delta H < 0$



# Haber-Born-Freisprozess

9/13/17



$$\Delta_B H = -404,8 \text{ kJ/mol}$$

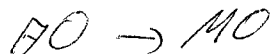
1.  $\text{Na}$  fest  $\rightarrow$   $\text{Na}$  gas.  $\hat{=}$  Sublimationsenthalpie  $= 108,4 \text{ kJ/mol}$
2.  $\frac{1}{2} \text{Cl}_2 \rightarrow \text{Cl}$   $\hat{=}$  Dissoziationsenthalpie  $= 121 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$
3.  $\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+$   $\hat{=}$  Ionisationsenergie  $= 494 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$
4.  $\text{Cl} \rightarrow \text{Cl}^-$   $\hat{=}$  Elektronenaffinität  $= -376 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$
5.  $\text{Na}^+ + \text{Cl}^- \rightarrow \text{NaCl}$   $\hat{=}$  Gitterenergie  $= -751 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$

$$\Delta_B H = -404 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

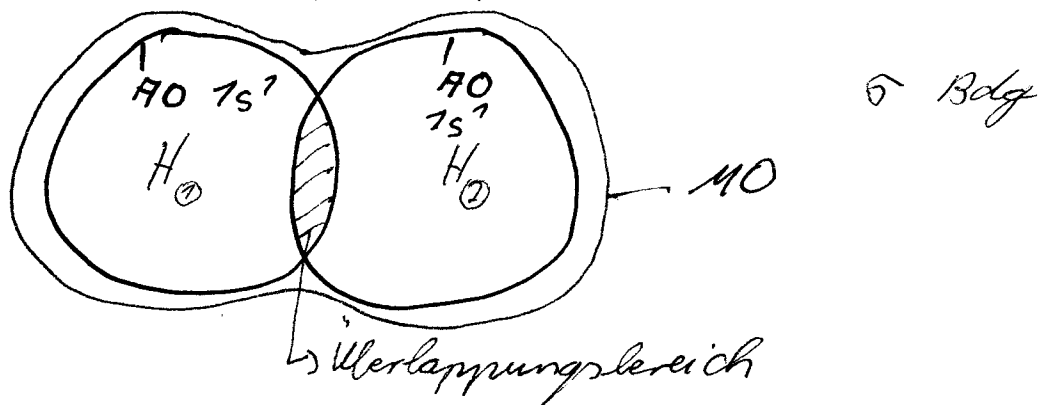
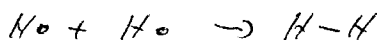
Zahlenwerte müssen nicht angegeben werden

# Atombindung

- gerichtete Bindung
- lokalisierte Bindungs-Elektronen
- Atomorbitale (AO) gehen über in Molekülorbitale (MO)



- Es gilt das Überlappungsprinzip

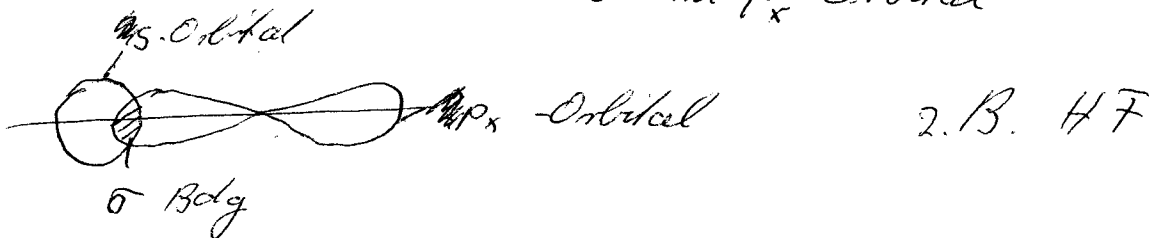


## σ Bdg

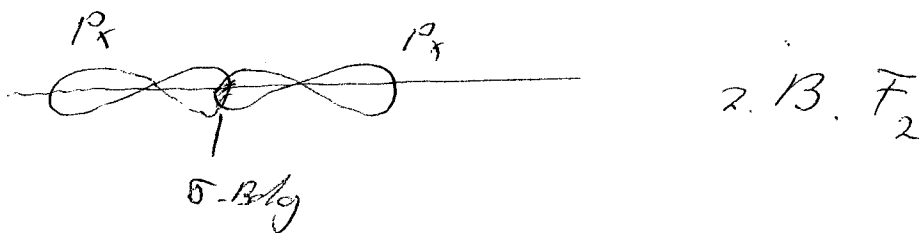
Es ist die einfachste Bindung.

Sie entsteht bei Überlappung von 2 s Orbitalen (siehe oben),

- bei der " " von s und  $p_x$  Orbital



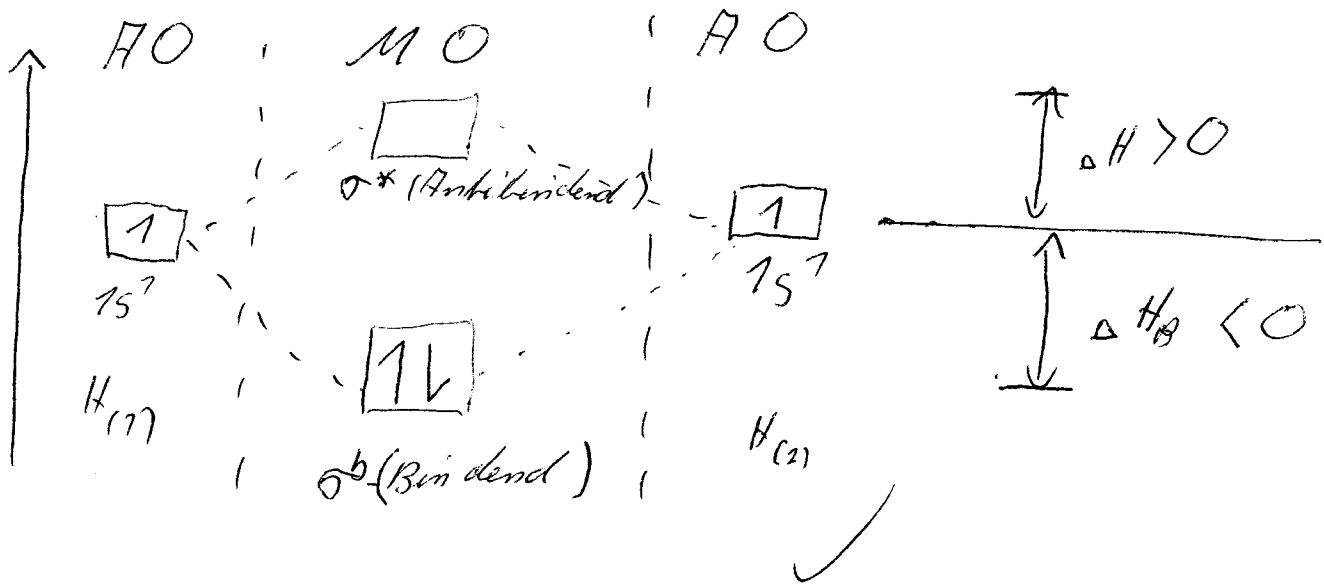
- bei der Überlappung von 2  $p_x$  Orb.



-  $\pi$ -Bindung

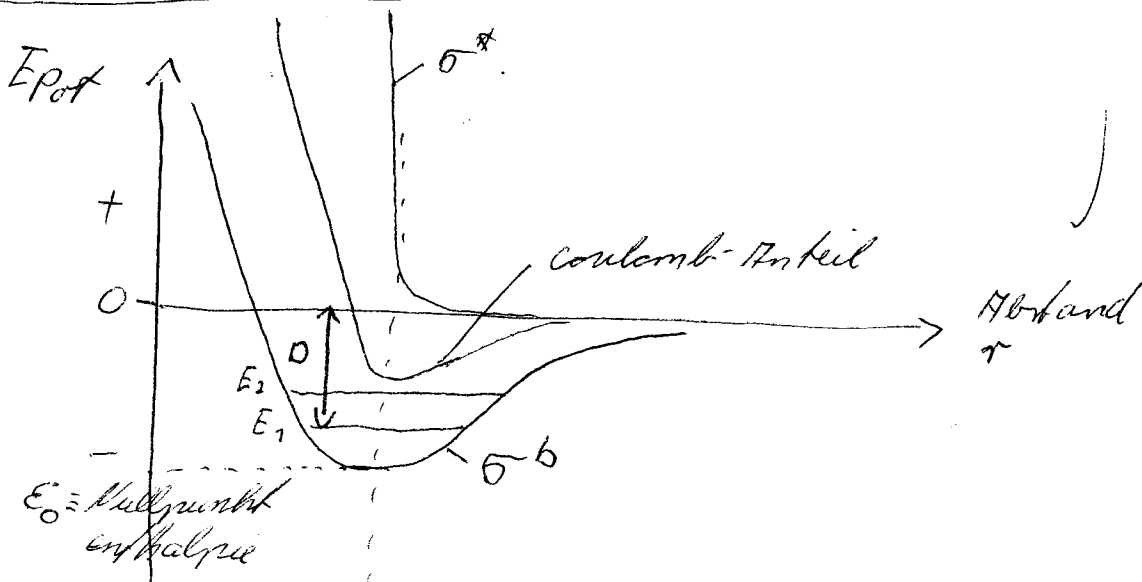
Auch die senkrecht zur Molekellachse stehenden  $p_y, p_z$  Orbitale können sich Bindungswirkung überlagern  $\rightarrow \pi$ -Bindung

- MO Schema ( $H_2$ )



$\sigma_b$  = Bindend  
 $\sigma^*$  = Antibindend

- Morse Pot.



Homölog

$$E_{pot} = D \cdot (e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)})$$

D: Dissoziationsenergie

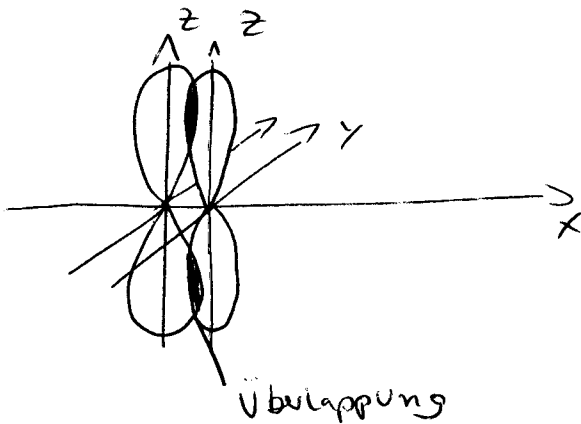
$r_0$ : Gleichgewichtsabstand

r: betrachteter Abstand

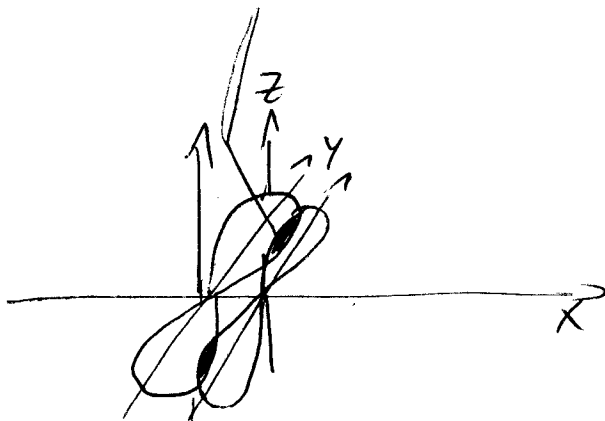
$$d = \sqrt{V_0 \frac{m_1 + m_2}{m_1 \cdot m_2}}$$

$V_0$ : Grundschwingung

$\pi$  - Poly.



p<sub>z</sub>-p<sub>z</sub> -  $\pi$ -Bindung

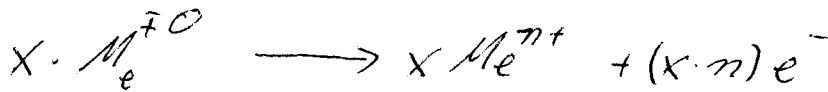


p<sub>y</sub>-p<sub>y</sub> -  $\pi$ -Bindung

# Metall. Boley

≡ Bindung im metallischen Zustand

1) Abgabe der Valenzelektronen in  
das "Elektronengas" → delokalisierte Bindungs-Elektronen



↳ Valenz Elektronen

→ ähnlich → Elektronengas

→ delokalisierte Bindungs e<sup>-</sup>

Das ist ein kollektiv-Phänomen. Elektronen sind frei beweglich und leicht ~~M~~anregbar.

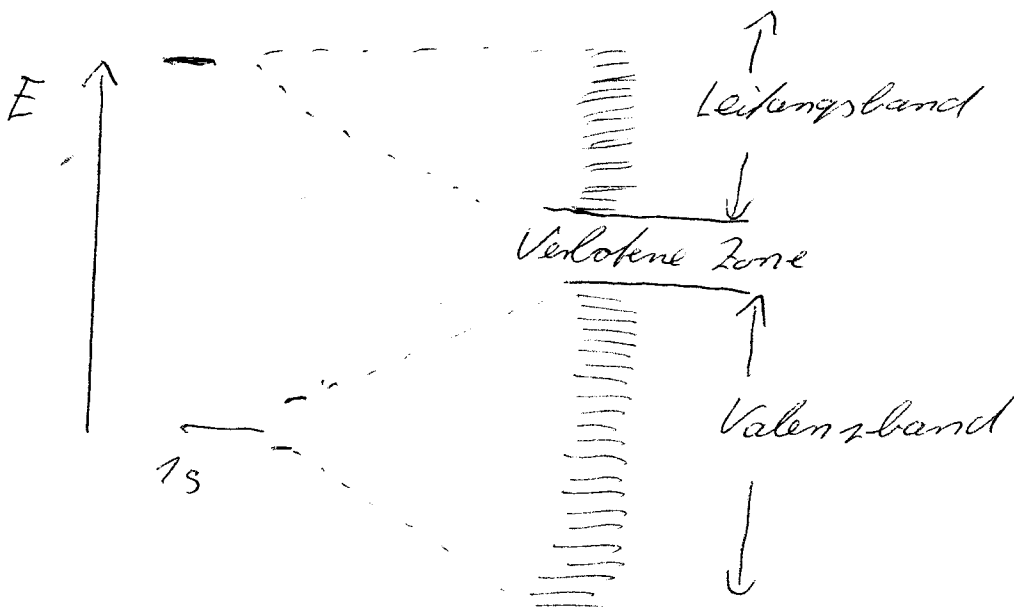
## 2) Bänder-Modell

$x \cdot n e^{-}$  befinden sich in  $2(x \cdot n)$  Orbitalen

Je Orbital gibt es nur ein Energieniveau

→ viele Orbitale = viele Energieniveaus

⇒ Bändermodell



# Eigenschaften

Material	Bandabstand
Isolatoren	sehr groß, nicht überwindbar
Halbleiter	groß, aber überwindbar
Metall (Leiter)	klein, Elektronen sind frei beweglich bzw. Überlappung

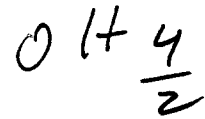
✓



# Wasserstoff-Brücken-Bdg

Rest

z.B. Wasser



H-Brücken-Bdg  $\uparrow$  muß freie el. Paare haben

Durch die H-Brücke läßt sich z.B. der hohe Siedepunkt von  $H_2O$  im Gegensatz zu anderen H-Verbindungen erklären.

Die H-Brücken-Bdg tritt immer dann auf, wenn sich das H-Atom zwischen 2 stark el. Neg. Atomen befindet, die einen geeigneten H-Partner haben.

## van der Waals-Bindung

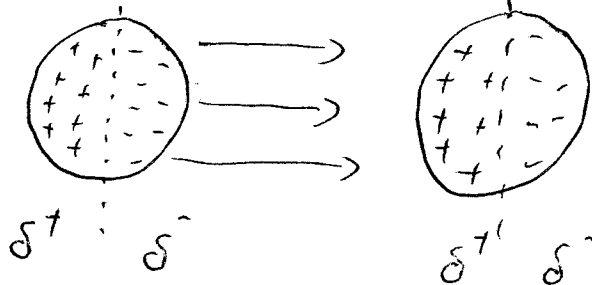
Fluktuation in der Elektronenhülle

↳ Bildung von Dipol

↳ schnelle Änderung der "Ladungsschwerpunkte"

↳ Induzierung weiterer Dipole

momentaner Dipol induziert induzierten Dipol



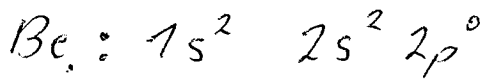
$\delta$  = partielle Ladung

- ungerichtete Bindung

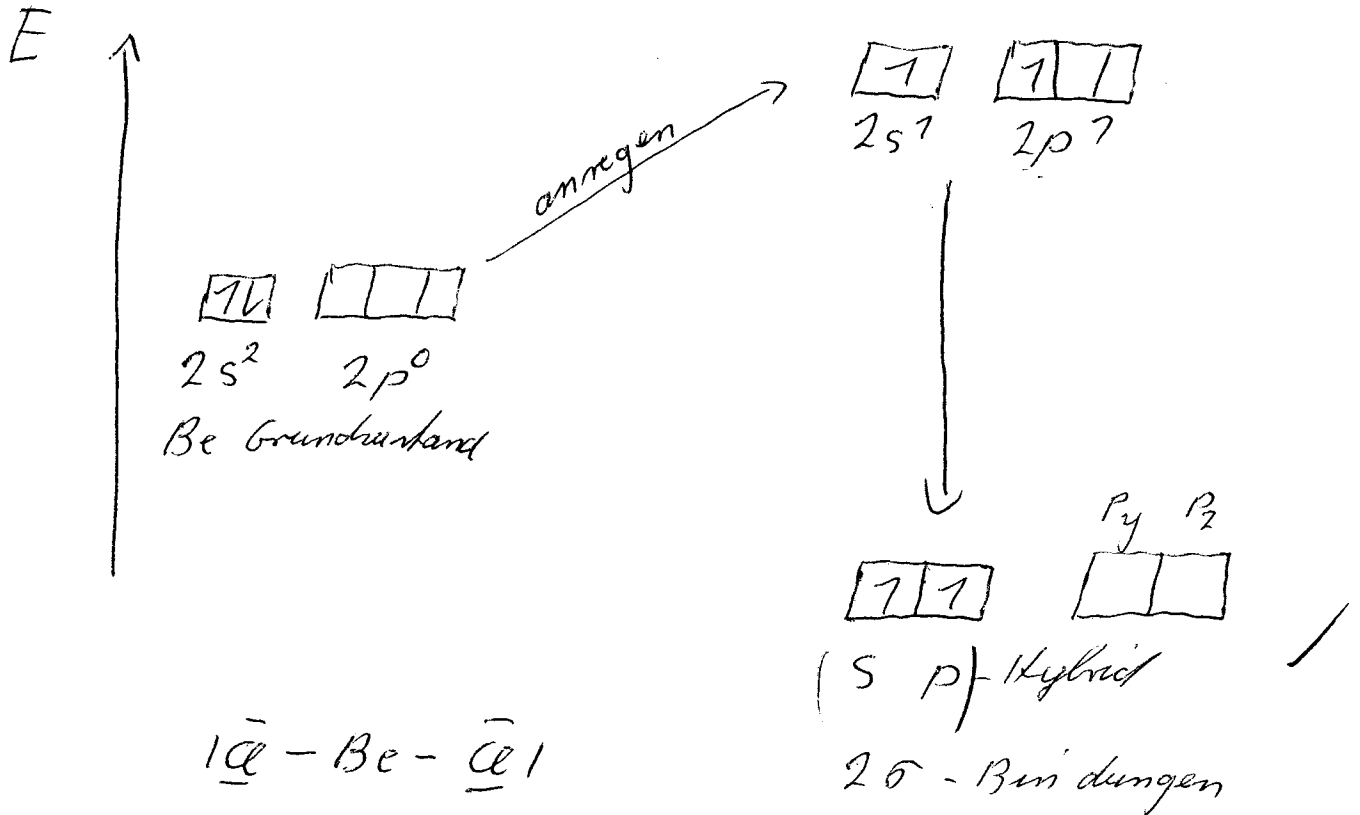
- nicht abträglich

# Hybridisierung

sp    z.B.     $\text{BeCl}_2$     - linear

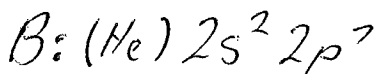


- Bdg &  $180^\circ$  ✓



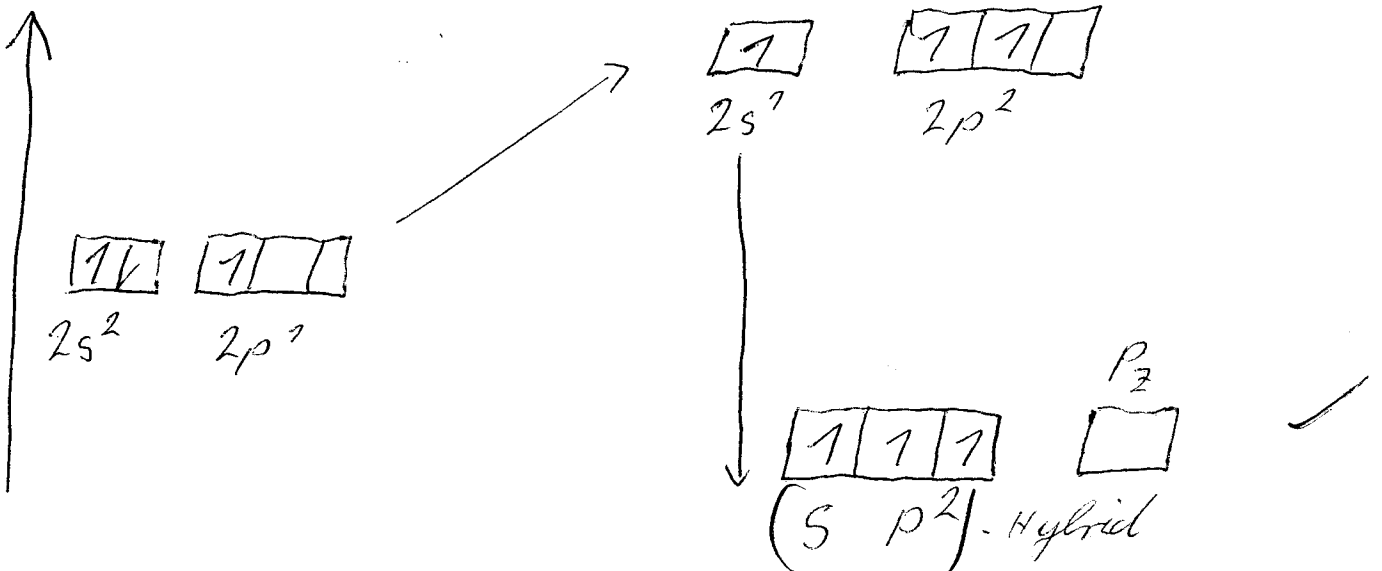
sp<sup>2</sup>    z.B.     $\text{BCl}_3$

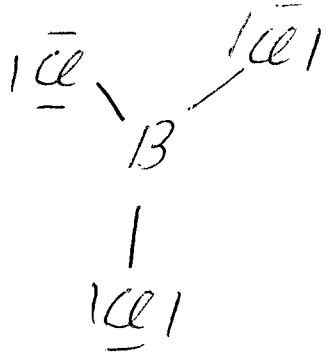
- trigonal planar



- Bdg &  $120^\circ$  ✓

- 3  $\sigma$  Bdg



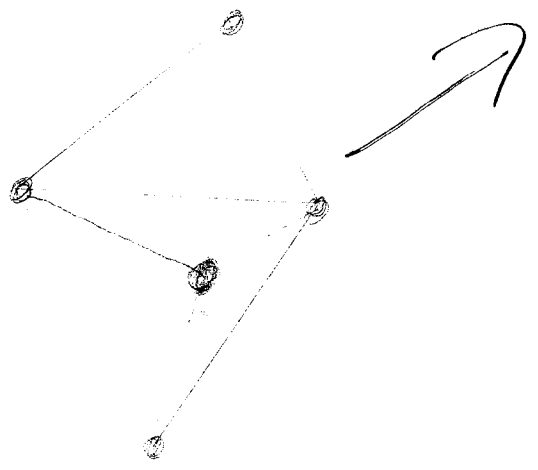
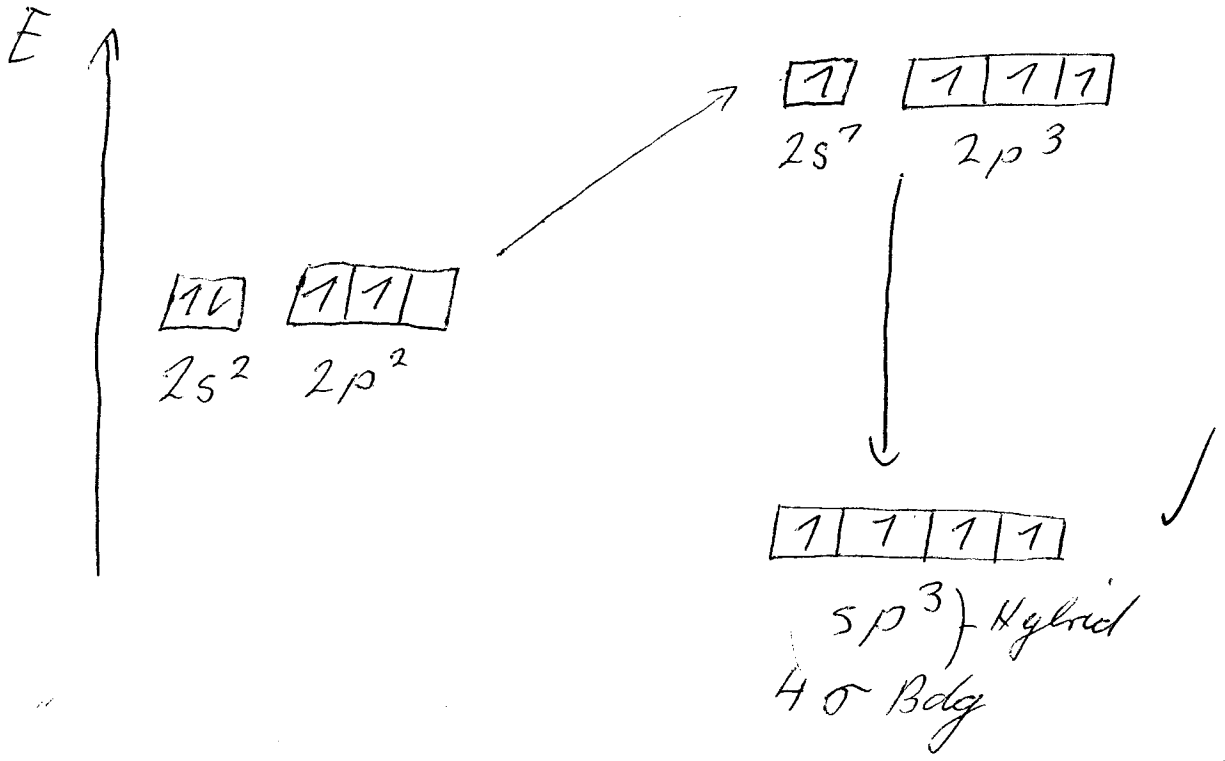


$sp^3$

z.B.  $\text{CH}_4$  (Methan)

- tetraedrisch  
- Bdg  $\approx 109^\circ$  ✓

C: (He)  $2s^2 2p^2$

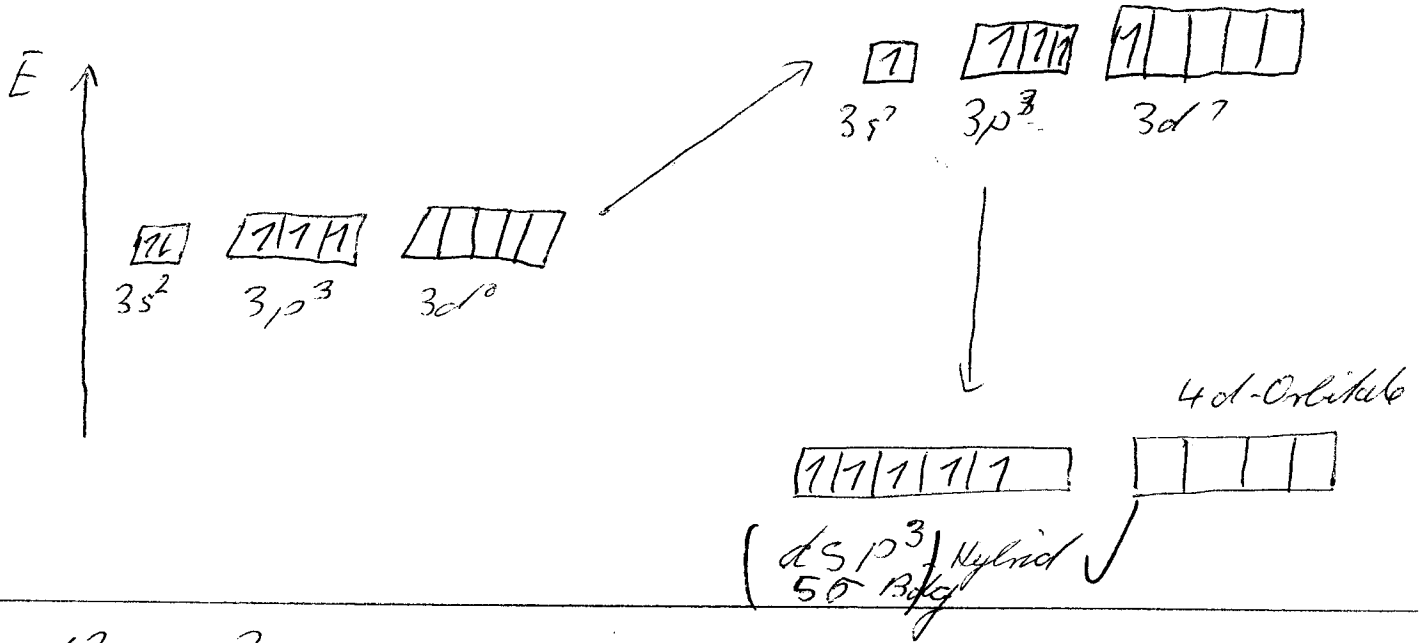


$dsp^3$

2.B.  $PF_5$

- trigonal bi-pyramidal
- Bdg  $\&$   $90^\circ$  bzw  $120^\circ$  ✓

P: (Ne)  $3s^2 3p^3 3d^0$

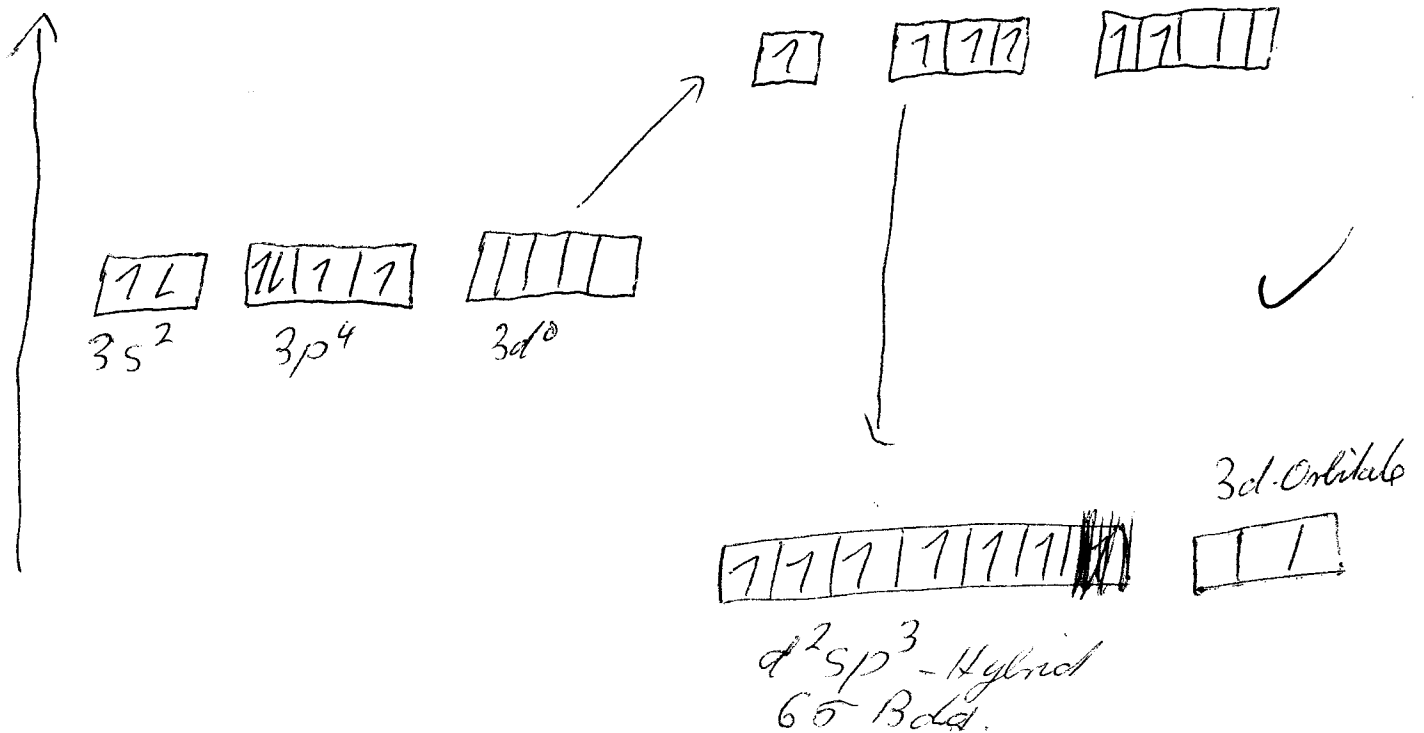


$d^2sp^3$

2.B.  $SF_6$

- oktaedrisch ✓
- Bdg  $\&$   $90^\circ$

S (Ne)  $3s^2 3p^4$



3. Def:  $pK_s$ -Wert:  $pK_s = -\lg K_s$   $K_s \equiv$  Säure-Konstante  
 (eigentliches Maß für Säure-Stärke)

Eigendissoziation + Ionenprodukt des Wassers

- (1)  $H_2O \rightleftharpoons H^+ + OH^- \Rightarrow$  Gleichgewicht ✓  
 (2)  $K_{H_2O} = \frac{[H^+] \cdot [OH^-]}{[H_2O]}$   $[H_2O] \equiv$  nicht dissoziiertes Anteil ✓

Konzentrationsangabe in  $\frac{Mol}{L}$

- (3)  $K_{H_2O} \cdot [H_2O] = [H^+] [OH^-]$   
 $K_{H_2O} = 1,8 \cdot 10^{-16} \left(\frac{Mol}{L}\right)$  experimentell ✓  
 $[H_2O] = \frac{1000 \text{ g}}{18} = 55,5$  ✓

(4) Ionenprodukt

$1,8 \cdot 10^{-16} \cdot 55,5 = [H^+] \cdot [OH^-]$  ✓  
 $= 10^{-14} \left(\frac{Mol}{L}\right)^2$

(5)  $[H^+] [OH^-] = 10^{-14} \left(\frac{Mol}{L}\right)^2$

(6)  $[H^+] = [OH^-]$  neutral, äquimolare Menge

(7)  $[H^+] = \left(10^{-14}\right)^{1/2} \frac{Mol}{L} = 10^{-7} \frac{Mol}{L}$   
 $[OH^-] = 10^{-7} \frac{Mol}{L}$  } Zustand des Wassers ✓

... 3.)

Def: pH-Wert

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

$$\textcircled{8} \quad pH = 7 \quad \Rightarrow \quad [H^+] = 10^{-7} \frac{\text{Mol}}{l} \quad \left. \vphantom{[H^+] = 10^{-7} \frac{\text{Mol}}{l}} \right\} \text{Neutral}$$

$$pOH = 7 \quad \Rightarrow \quad [OH^-] = 10^{-7} \frac{\text{Mol}}{l} \quad \left. \vphantom{[OH^-] = 10^{-7} \frac{\text{Mol}}{l}} \right\} \nearrow$$

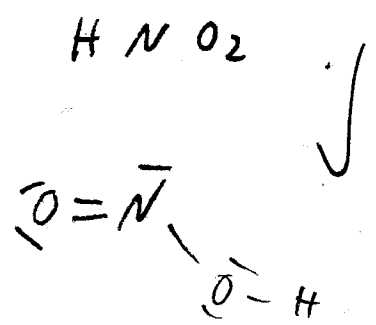
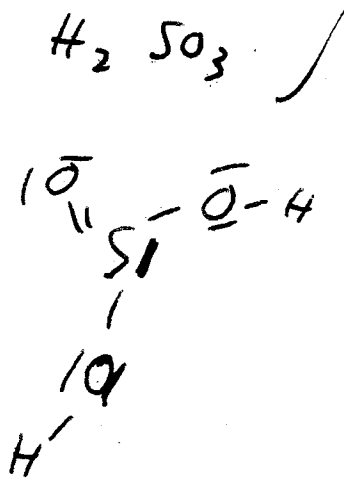
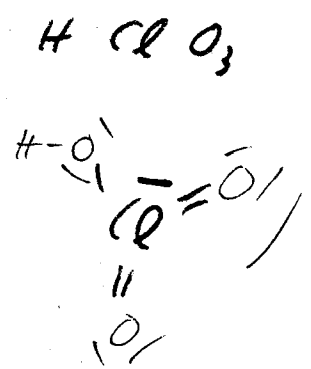
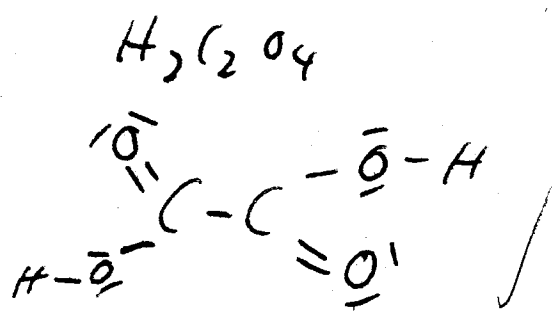
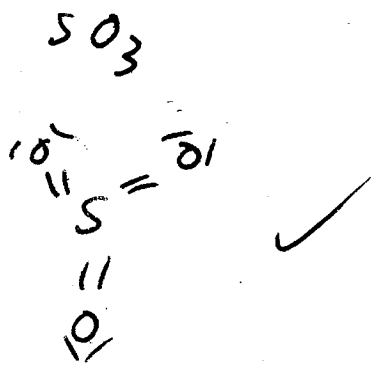
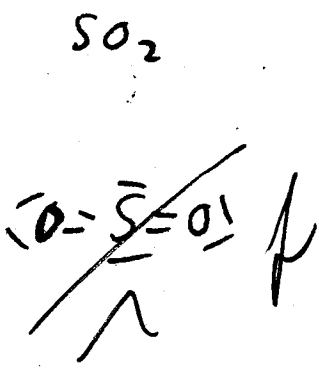
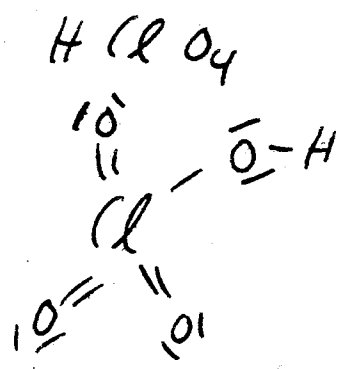
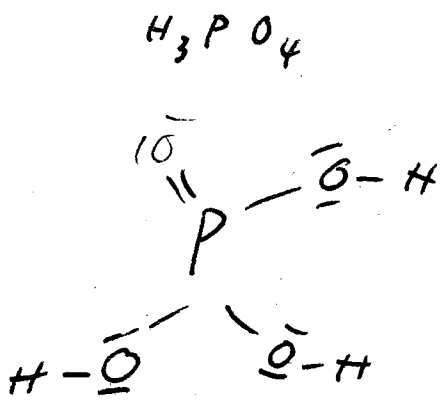
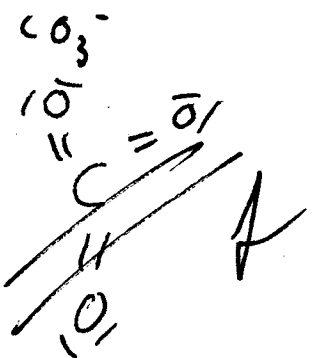
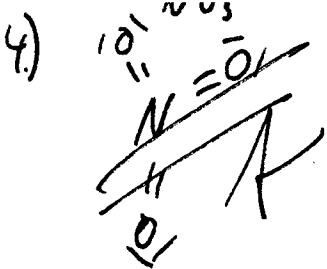
$$pH < 7 \quad \Rightarrow \quad [H^+] > 10^{-7} \frac{\text{Mol}}{l}$$

↳ sauer

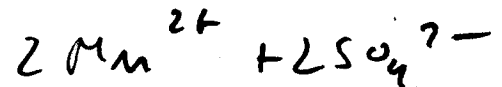
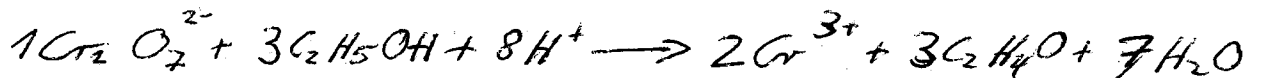
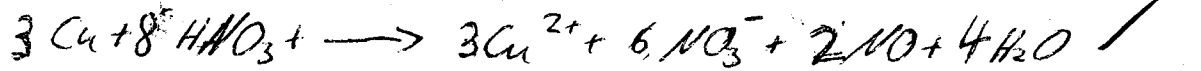
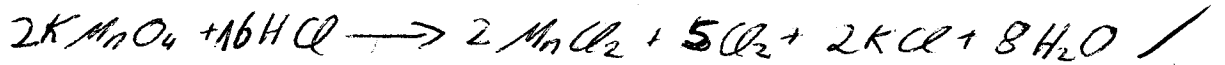
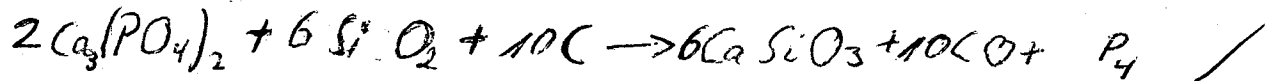
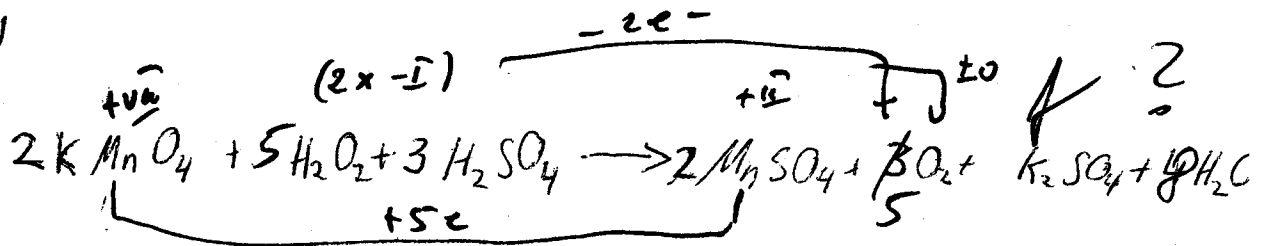
$$pH > 7 \quad \Rightarrow \quad [H^+] < 10^{-7} \frac{\text{Mol}}{l}$$

↳ basisch, alkalisch

$$\textcircled{9} \quad pH + pOH = 14 \quad \checkmark$$



5)







## II. 1 a)

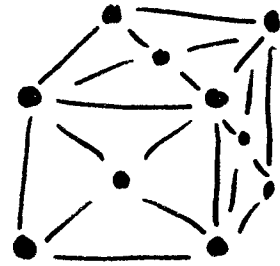
Cu-Typ

Kubisch Flächenzentriert (kfz)

Dichtestpackung

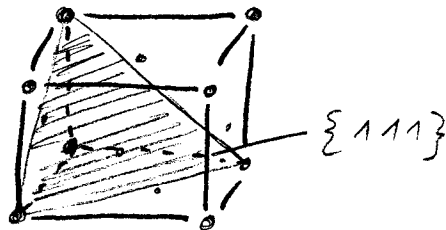
Bravais-Typ: F

Atomlagen: 1.  $(0, 0, 0)$   
2.  $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$



$\gamma$ -Fe

Gleitebenen



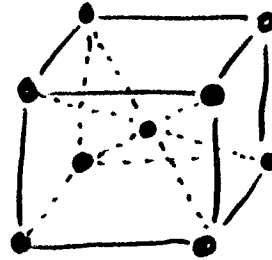
W-Typ

Kubisch Raumbzentriert (krz)

Keine Dichtestpackung

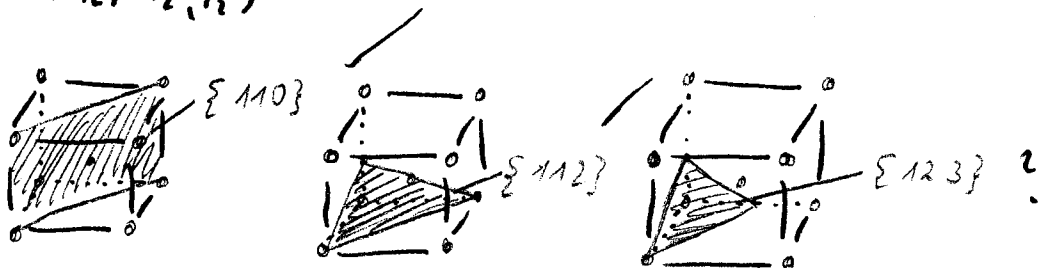
Bravais-Typ: I

Atomlagen: 1.  $(0, 0, 0)$   
2.  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$



$\alpha$ -Fe

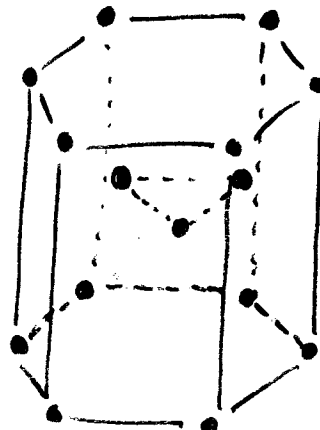
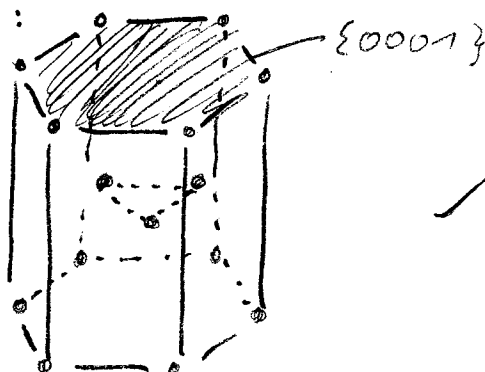
Gleitebenen:



Mg-Typ

Hexagonale Dichtestpackung (HdP)

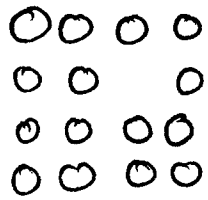
Gleitebenen:



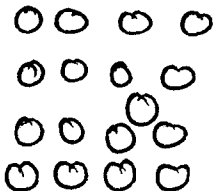
	Gleitebenen		Gleitrichtung		Gleitsysteme
Cu	$\{111\}$	x	$\langle 110 \rangle$	=	(24) (abh.)
	4	x	3	=	12 (unabh.)
W	$\{110\}$	x	$\langle 111 \rangle$	=	
	6	x	2	=	12
Mg	$\{0001\}$	x	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	=	
	1	x	3	=	3

## Baupfehler

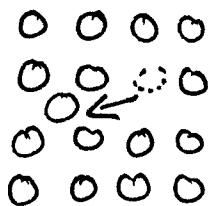
0-Dim (Punktfehler)



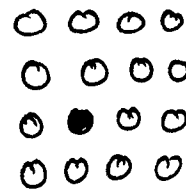
leerstelle



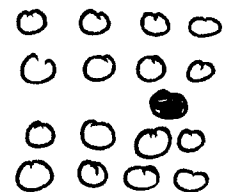
Zwischenatom



Frenckel-Paar

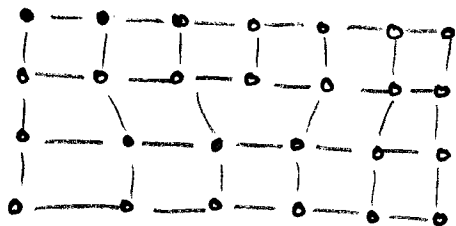


Substitutions-  
Atom



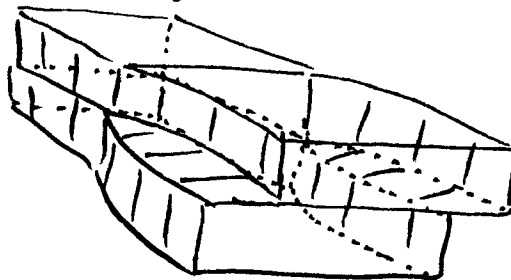
Einlagerungs-  
atom

1-Dim (Linienfehler)



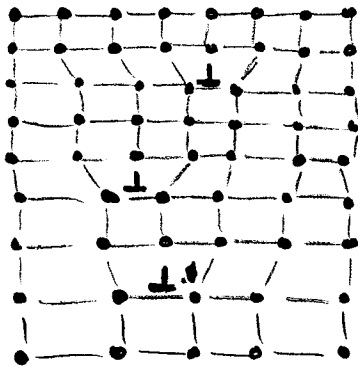
Stufenversetzung

Versetzungen



Schraubenversetzung

## 2-Dim (Flächenfehler)



Kleinwinkelkorngrenze  
(Übereinanderreihung von  
Stufenversetzungen)

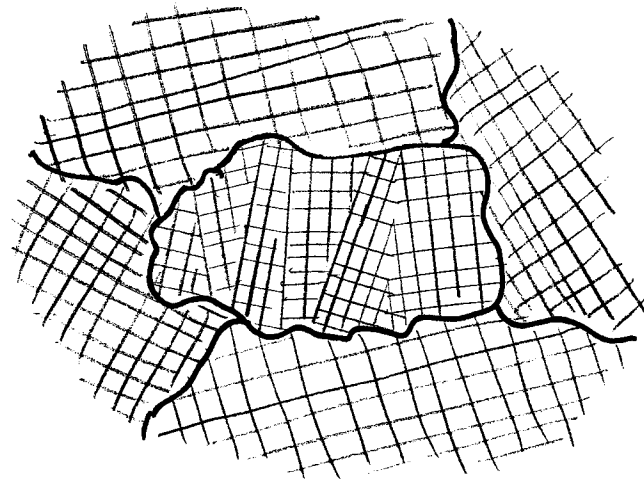
~~ABC ABC ABC~~

ABC ABC AB AB ABC

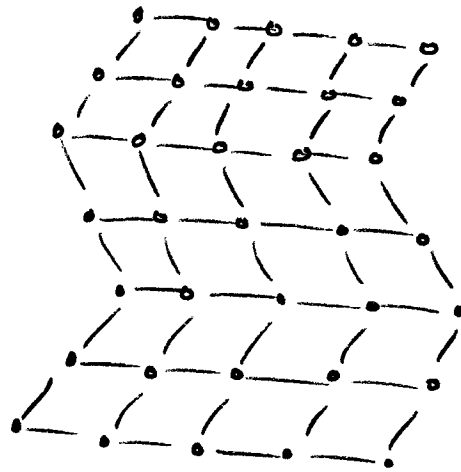
Stapelfehler

Bedeutung der BF:

Beeinflussung der Eigenschaften:



Großwinkelkorngrenze

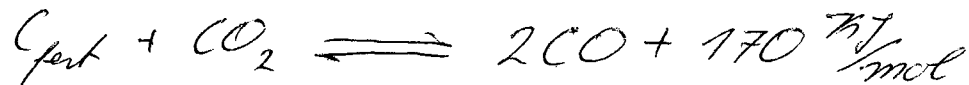


Zwillingsbildung

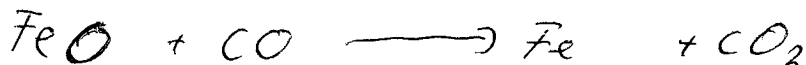
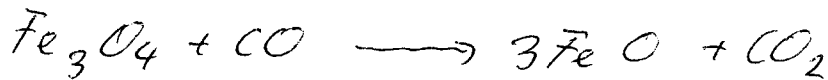
- plast. Verformbarkeit
- „gefüge“
- Festigkeit
- Leitfähigkeit
- mech. Eigenschaften
- „Kriechvermögen“
- Diffusionsvermögen
- Wärmebehandlung u.v.a.m.

# Hochofen-Prozeß

Reduktion von  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  durch Koks über  
Boudouard-Gleichgewicht



## 1. indirekte Reduktion



↳ Roheisen mit Reinheitsgrad  
von 95~97%

## 2. direkte Reduktion



es liegt eine Carbide-Bildung vor <sup>Bildungs oder Bindung?</sup>



"Zementit"

## 89 Teil II

### 3.) Freies Volumen

$$\textcircled{1} \quad \text{SiO}_2 \text{ - Quarz} = 2,655 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

$$\text{SiO}_2 \text{ - Glas} = 2,21 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

Volumen der  $\text{O}^{2-}$ -Ionen

$$\begin{aligned} V(\text{O}^{2-}) &= \frac{4}{3} \pi r_{\text{O}^{2-}}^3 \cdot N_A & r_{\text{O}^{2-}} &= 1,4 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ &= \frac{4}{3} \pi \cdot 1,4 \cdot 10^{-10} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \\ &= 3,53 \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}} \end{aligned}$$

② Faktor 1,27 "Leervolumen in der dichtesten" Packung

$$V_{\text{O}^{2-}} = \text{theoretisch} = 7,5 \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$$

③ Theoretische Dichte von  $\text{SiO}_2$

$$\rho_{\text{SiO}_2 \text{ theorel.}} = \frac{M_{\text{SiO}_2}}{7,5} = \frac{60}{7,5} = 8 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

↳ nicht einmal im kristallinen Zustand

$$V_{\text{SiO}_2}^{(\text{O}^{2-})} = \frac{M_{\text{SiO}_2}}{2 \rho_{\text{SiO}_2 \text{ theorel.}}} = \frac{60}{2 \cdot 8} = 3,75 \text{ cm}^3$$

Allg. für Industriegläser:

$$V_{(\text{O}^{2-})} = \frac{\bar{M}_i}{S_u} \cdot \frac{1}{\sum x_i \cdot n_i}$$

$S_u$ : Dichte Glas

$M_i$ : Molekulargewicht

$n_i$ : Stöchiometriezahl  $\text{O}^{2-}$

$x_i$ : Molenbruchkomponente

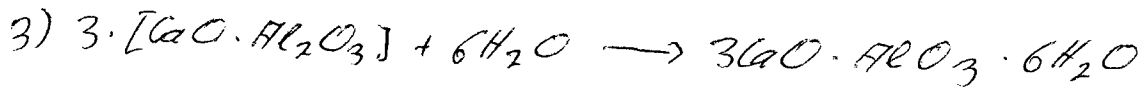
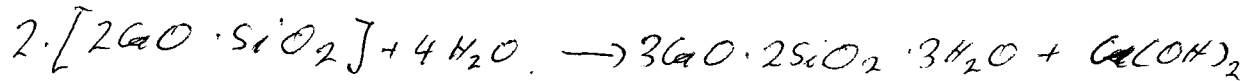
# Zementphasen

- 1)  $3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2 \rightleftharpoons \text{Ca}_3\text{SiO}_5$
- 2)  $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2 \rightleftharpoons \text{Ca}_2\text{SiO}_4$
- 3)  $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \rightleftharpoons \text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$
- 4)  $2\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \rightleftharpoons \text{Ca}_2\text{Al}_2\text{O}_5$   $\text{Ca}_2\text{Al}_2\text{O}_5$

Verfertigung durch Einbau von "Kristallwasser"



2) Verfertigung als ein, weil



Analog mit  $\text{Fe}_2\text{O}_3$