

# Elektronenstruktur

Dirk Fröhlich & Patrick Hartwich

Die Elektronenstruktur spiegelt die Orbitalbesetzung der verschiedenen Elemente wieder. Diese Besetzung erfolgt, in dem man bei allen Elementen, beginnend beim Wasserstoff-Atom, in der Reihenfolge des Periodensystems der Elemente, die Kernladung jeweils um eine positive Ladung erhöht, sowie der Elektronenhülle ein Elektron hinzufügt. Das neue Elektron besetzt dabei das energetisch günstigste, verfügbare Orbital (Aufbauprinzip nach Pauli).

Alle Orbitale einer Unterschale sind energetisch gleichwertig, in einer Schale unterschieden sich jedoch die verschiedenen Unterschalen in ihren Energien. Diese steigen in der Reihenfolge  $s < p < d < f$ . Dabei kann es zu einer Überschneidung in der energetischen Abfolge kommen. So liegt zum Beispiel das 4s-Orbital energetisch niedriger als das 3d-Orbital.

In den meisten Fällen gilt folgendes Aufbauprinzip:

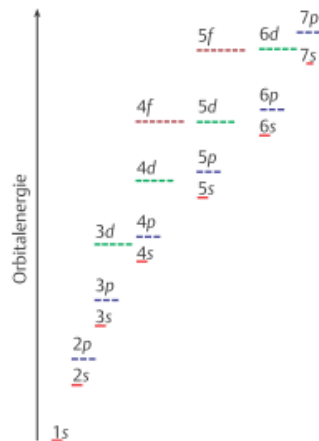
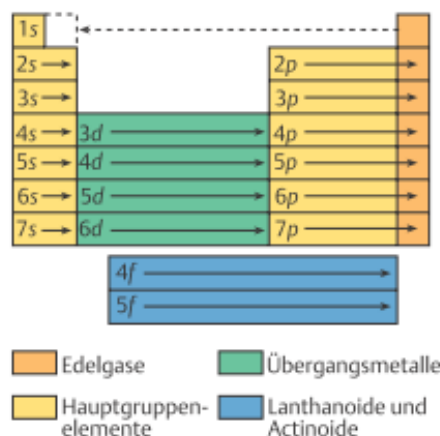


Abb. 1: Besetzung und relative Energien der Atomorbitale<sup>1</sup>

Allgemein gibt es jedoch keine für alle Elemente gültige Standardabfolge für die Orbitalenergien. Die einzelnen Orbitale werden der Abbildung 1 entsprechend von unten nach oben jeweils mit einem weiteren Elektron besetzt, wobei die Hund'sche Regel zu beachten ist.

Die Elektronenkonfiguration der einzelnen Elemente spiegelt sich in ihrer Anordnung im Periodensystem wieder. Das Periodensystem lässt sich somit in verschiedene Blöcke einteilen, wie in der folgenden Grafik dargestellt:



<sup>1</sup> Mortimer, C.E., Müller U., Chemie, Thieme, Stuttgart, 2003<sup>8</sup>.

Abbildung 2: Einteilung des Periodensystems in Orbitalblöcke<sup>2</sup>

Alle Elemente des s- und p-Blocks gehören zu den Hauptgruppenelementen, Elemente des d-Blocks zu den Übergangsmetallen bzw. Nebengruppenelementen und Elemente des f-Blocks zu den Lanthanoiden und Actinoiden. Die Besetzung der d- und f-Orbitale weist wiederum eine Unregelmäßigkeit auf. Hier werden bei manchen Elementen die Unterschalen aus Gründen der Stabilität lieber halbbesetzt (z.B. Chrom (Z=24) mit  $3d^5 4s^1$  statt  $3d^4 4s^2$ ) oder vollbesetzt (z.B. Kupfer (Z=29) mit  $3d^{10} 4s^1$  statt  $3d^9 4s^2$ ). Bei der Elektronenkonfiguration der Edelgase sind alle Unterschalen vollbesetzt (Edelgaskonfiguration), da diese Besetzung besonders stabil ist, was sich in der geringen chemischen Reaktivität der Edelgaselemente zeigt.

### Quellen:

Binnewies M., Jäckel M., Willner H., Rayner-Canham G., Allgemeine und Anorganische Chemie, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, 2004<sup>1</sup>.

Lexikon der Chemie, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, 2008.

Mortimer, C.E., Müller U., Chemie, Thieme, Stuttgart, 2003<sup>8</sup>.

---

# Molekülstruktur

Holger Schmidt (830241), Stephan Vogt (827759)

Bei der Diskussion der Molekülstruktur sind folgende Hauptmerkmale zu charakterisieren:

- Definition des Strukturbegriffs
- Geschichte des Begriffs der Molekülstruktur
- Bedeutung der Molekülstruktur
- Aufklärung von Molekülstrukturen
- Moderne Sicht der Molekülstruktur und Ausblick

## Definition des Strukturbegriffs:

Als Molekülstruktur bezeichnet man die räumliche Anordnung von Atomen in einem Molekül zueinander. Dabei gibt es mehrere unterschiedliche Darstellungsweisen, die unter anderem für die Arbeit in rechnergestützten Programmen oder in der menschlichen Vorstellungskraft optimiert sind. Besonders erwähnenswerte Merkmale der Struktur eines Moleküls sind die Anzahl und Art der Atome, deren Koordination, Konstitution und Konformation untereinander sowie die Bindungslängen, -winkel und die Diederwinkel.

Neben allen oben genannten geometrischen Eigenschaften eines Moleküls spielen auch die physikalischen Verhältnisse wie die Verteilung der elektrischen Ladung in einem Molekül eine wichtige Rolle. Beispiele für solche Moleküle sind das Sulfat- oder das Phosphat-Ion.

## Geschichte des Begriffs Molekülstruktur:

Ein echter Vater des Begriffs Molekülstruktur lässt sich nicht wirklich finden. Stattdessen wurde der Gedanke an die Anordnung der Atome in einem Molekül nach und nach verfeinert bzw. durch neue Kenntnisse fokussiert- doch es ist kein Wissenschaftler für die Postulation der These „Molekülstruktur“ berühmt geworden.

Nachdem der Begriff des Atoms nach der griechisch-hellenistischen Zeit in Vergessenheit geriet und erst im 17. Jahrhundert wieder aufgegriffen wurde, entwickelte sich der Gedanke an eine systematische Verknüpfung von Atomen in Molekülen in kleinen Schritten; einen bedeutenden Sprung hin zur Molekülstruktur wurde dann um 1860 von Friedrich August Kekulé gemacht, der anhand der heute noch verwendeten Kekulé-Schreibweise die Bindungsverhältnisse im Benzol erklärte und damit ein berühmtes Beispiel für wissenschaftliche Arbeiten an der Molekülstruktur darstellt. Ein weiterer wichtiger Aspekt bei der Entwicklung des Konzeptes „Molekülstruktur“ war 1940 die Postulation der VSEPR- Theorie durch *Sidgwick* und *Powell*, die damit zum ersten mal quantentheoretische und elektrische Effekte von Zentralatom und Substituenten in eine einfache Regel umsetzten.

Der Bereich der heute sogenannten theoretischen Chemie wurde dann um viele Rechenmethoden und Regeln erweitert- die wichtigsten sind die *Valenzbindungstheorie*, die *Molekülorbitaltheorie* sowie die *ab-initio Rechnungen* und die *semi-empirischen Rechenverfahren*.

## Bedeutung der Molekülstruktur:

Die Kenntnis der Molekülstruktur einer Verbindung liefert wichtige Informationen darüber, welche Reaktionen für die Verbindung möglich sind und wie stark die Reaktivität in etwa ist. In der organischen Chemie unterscheidet man die Molekülstruktur in das Grundgerüst des Moleküls (Kohlenstoffkette) und die funktionellen Gruppen. Dabei bestimmen die funktionellen Gruppen die dem Molekül offen stehenden Reaktionsmöglichkeiten und -mechanismen. Wichtige Vertreter sind die verschiedenen Formen der Carbonyle, Alkohole, Ether, Aromaten, Aliphaten und Amine. Das Grundgerüst einer organischen Verbindung ist die Kohlenstoffkette. Je voluminöser diese Kette ist, desto größer ist die sterische Hinderung bei der Reaktion einzuordnen. Außerdem lässt dieses Grundgerüst Rückschlüsse auf einige Mechanismen zu, z.B ob es sich um eine nucleophile aliphatische Substitution erster oder zweiter Ordnung handelt bzw. die besonderen Reaktionsmechanismen, die in aromatischen Systemen gelten. Ganz besonderer Wert wird seit der jüngeren Vergangenheit auf die stereoselektive Synthese bzw.

auf die Aufklärung der Konfigurationen an chiral substituierten Atomen gelegt, da es sich hierbei um kleine Unterschiede mit großen Wirkungen in der Eigenschaft einer Verbindung handelt. Zusammenfassend kann man sagen, dass die Molekülstruktur für den Chemiker die wichtigste Information bei der Vorhersage der Eigenschaften einer Verbindung ist.

Durch die mittlerweile massiv gewachsene Bedeutung der Energieeinsparung in der chemischen Synthese durch Katalyse ist auch die Koordination von Molekülen an Katalysatoren von großem Interesse, deren Voraussage genaue Informationen über die Molekülstruktur voraussetzen.

### **Aufklärung von Molekülstrukturen:**

In den Anfängen der Strukturaufklärung für organische Moleküle wurde vor allem die analytische Synthese bemüht: Sie sah eine Umsetzung mit verschiedenen Reagenzien vor und charakterisierte dann die physikalischen und chemischen Eigenschaften der Produkte, die eine relativ gute Identifizierung der Substanz ermöglichten.

Mittlerweile gibt es zur Strukturaufklärung aber viele instrumentelle Methoden, die schneller und meist auch effizienter sind. Wichtige Techniken sind die NMR- und die IR-Spektroskopie, die Massenspektrometrie (die aber oftmals mehr zur Identifizierung einer Verbindung dient) sowie die Röntgenstrukturanalyse.

Die IR- Spektroskopie (Infrarot- Spektroskopie) ist eine Methode, die nur für Verbindungen mit veränderbarem Dipolmoment einsetzbar ist und ausschließlich ein Screening funktioneller Gruppen ermöglicht. Die Erkennung der genauen Struktur der Kohlenstoffkette ist mit der IR- Spektroskopie nicht möglich, aber gerade diese Lücke wird durch die NMR- Spektroskopie (Nuclear Magnetic Resonance) geschlossen, die sowohl funktionelle Gruppen als auch die Konstitution der Kohlenstoffkette aufklären kann.

Die Massenspektrometrie kann sowohl funktionelle Gruppen als auch die Länge der Kohlenstoffkette erkennen, allerdings sind Isomere nicht zu unterscheiden (siehe NMR).

Eine weitere Aufklärung der Molekülstruktur ist durch die Röntgenstrukturanalyse möglich; für diese Art der Strukturforschung wurde ein Nobel-Preis für Chemie im Jahre 2009 verliehen, als die Wissenschaftler *Venkatraman Ramakrishnan*, *Thomas A. Steitz* und *Ada E. Yonath* durch Röntgenstrukturanalyse die Struktur der auskristallisierten Ribosomen des Menschen bis auf die Ebene des einzelnen Atoms aufklären konnten.

Während die NMR- und die IR- Spektroskopie auch ohne moderne Datenverarbeitungstechnologie auskommen könnten, arbeiten die Massenspektrometrie und die Röntgenstrukturanalyse wegen des großen damit verbundenen Arbeitsaufwands fast nur noch rechnergestützt.

### **Moderne Sicht der Molekülstruktur und Ausblick:**

Die Bedeutung der Molekülstruktur hat in den vergangenen Jahrzehnten immer mehr an Bedeutung gewonnen, vor allem nachdem man die biologische Bedeutung der Stereoisomere auf den Körper kennengelernt hat. Das wohl berühmteste und auslösende Beispiel für die Erforschung der biologischen Wirksamkeit von Stereoisomeren wurde durch den Skandal um das Medikament Thalidomid gegeben.

Da die Biochemie bzw. die Nutzung der biologischen Komponente wie Bakterien und Enzymen in der Chemie immer mehr an Bedeutung gewinnt, ist damit zu rechnen, dass die Struktur der reaktiven Zentren in Enzymen und anderen biochemischen Verbindungen ebenfalls wichtiger werden wird. Möglicherweise wird es dann auch eine neue Form der Strukturangabe der reaktiven Zentren von biochemischen Verbindungen geben, die von der bisherigen Lewis- (bzw. Kekulé-) Schreibweise abweicht um der Komplexität gerecht zu werden.

### **Verwendete Literatur:**

- Hollemann, Wiberg: *Lehrbuch der anorganischen Chemie*, 102. Auflage, deGruyter-Verlag. Seite 313 (Unterabschnitt: Geschichtliches)
- [http://de.wikipedia.org/wiki/Liste\\_der\\_Nobelpreisträger](http://de.wikipedia.org/wiki/Liste_der_Nobelpreisträger) (zum Nobelpreis für Chemie 2009)
- [http://de.wikipedia.org/wiki/Friedrich\\_August\\_Kekulé\\_von\\_Stradonitz](http://de.wikipedia.org/wiki/Friedrich_August_Kekulé_von_Stradonitz)
- Größtenteils eigenes Wissen niedergeschrieben (ca. 90%)

# Kristallstruktur

Oliver Flender und Johannes Klein

Sind Atome, Ionen oder Moleküle in dreidimensional-periodischer Weise zu einem größeren, homogenen Verband zusammengepackt, so spricht man von einem Kristall. Dabei wird die räumliche Anordnung der Teilchen *Kristallstruktur* genannt.

Verbindet man in Gedanken die sich periodisch wiederholenden Atome/Ionen/Moleküle in allen drei Raumrichtungen zu einem dreidimensionalen Gitter verbunden, erhält man daraus das sog. *Kristallgitter*. Es ist aus gleichartigen Punkten zusammengesetzt, die immer dieselbe Umgebung haben.

Die kleinste Einheit des Kristallgitters nennt man *Elementarzelle*. Es ist ein Parallelepiped, das man dreidimensional lückenlos aneinanderreihen kann und so das Gitter bildet. Sie wird durch sog. *Basisvektoren* charakterisiert, die als **a**, **b** und **c** tituliert werden und zusammen die *Basis* aufspannen. Der Aufbau des Kristallgitters kann dadurch als die Gesamtheit der Linearkombination  $\mathbf{t} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$  mit  $u, v, w \in \mathbb{Z}$

beschrieben werden. Dabei müssen **a**, **b** und **c** nicht zwangsläufig senkrecht aufeinander stehen, sondern sie können auch ein schiefwinkliges Koordinatensystem aufspannen, somit sind nicht nur die Beträge der Vektoren (**a**, **b** und **c**) interessant, sondern auch die entsprechenden Winkel  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$ .

Im dreidimensionalen Raum können genau 14 unterschiedliche Gittertypen definiert werden (Bravais-Gitter), die zusammen mit den Translations- und Symmetrieelementen 230 mögliche Raumgruppen bilden.

## Kristallstrukturanalyse

Aufgrund der besonders regelmäßigen Struktur und den daraus resultierenden spezifischen Kristallebenen, eignet sich die Streuung von elektromagnetischen sowie Teilchenwellen an Kristallen besonders gut um Rückschlüsse auf die Struktur schließen zu können.

Prinzipiell gilt, dass Wellen mit Strukturen besonders gut interferieren, wenn deren Größe im Bereich der Wellenlänge liegt. Da der Netzebenenabstand eines Kristalls im Ångström-Bereich liegen eignen sich somit besonders gut Röntgenstrahlen (Standardmäßig die  $K_\alpha$ -Linie von Kupfer). Auch die kostspieligen und aufwändig zu erzeugenden Neutronenstrahlen finden bei der Strukturaufklärung Anwendung.

## Röntgenbeugung

Im allgemeinen werden hauptsächlich Röntgenstrahlen verwendet. Da bei ihnen der Teilchencharakter besonders wenig ausgeprägt ist, lassen sich die Beugungsphänomene am einleuchtendsten erklären:

- Die in einer Röntgenröhre erzeugte Strahlung besteht aus der einigermaßen kontinuierlichen Bremsstrahlung und den anodenspezifischen Peaks der K- und L-Übergänge
- Durch einen gebogenen Monochromatorkristall (z.B. aus Ge) wird die intensivste Wellenlänge ( $K_\alpha$ ) auf den Detektor fokussiert.
- Im Strahlengang befindet sich ein rotierender Einkristall oder ein pulverisierter kristalliner Stoff (Statistische Ausrichtung aller Netzebenen im Pulver.)
- Sowohl die Monochromatisierung/ Fokussierung als auch die Beugung der Strahlen durch die Probe beruhen auf der Bragg-Reflexion.

Hierbei interferieren die Strahlen mit verschiedenen Netzebenen. Der resultierende Gangunterschied führt nur bei wenigen Winkeln zu einer konstruktiven Interferenz.

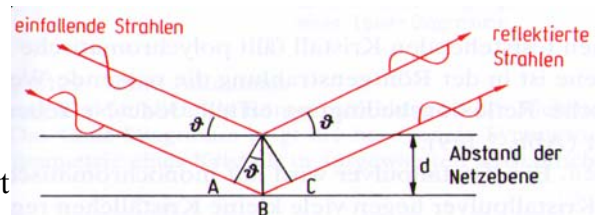


Abbildung 1: Reflexion von Röntgenstrahlen an Netzebenen eines Kristallgitters.

- Die resultierenden Beugungsmuster werden zur Indizierung mit Computerprogrammen untersucht.

Röntgenstrahlung interferiert mit den Elektronenhüllen der Atome in der Probe. Somit steigt mit deren Ordnungszahl auch das Streuvermögen. Dies hat zur Folge, dass Leichte Elemente wie etwa Wasserstoff nicht zu erkennen sind.

### Neutronenbeugung

Diesen Nachteil haben Neutronenstrahlen nicht. Das Streuvermögen ist unabhängig von der Ordnungszahl. Dies ergibt sich aus den beiden folgenden Wechselwirkungen:

- Bei der Kernstreuung ist die Interferenz auf Neutron-Kern-Wechselwirkungen zurückzuführen.
- Im Gegensatz dazu ist die Magnetische Streuung durch Dipol-Dipol-Wechselwirkungen hervorgerufen welche zwischen Neutron und Elektronenhülle auftreten.

Literaturnachweis:

Abbildung 1: Riedel/Janiak; Anorganische Chemie; 7. Aufl. de Gruyter; Berlin; 2007; S. 221 (Abbildung 2,127).

Text

-Riedel/Janiak; Anorganische Chemie; 7. Aufl. de Gruyter; Berlin; 2007; S. 220ff., 678.

-Römpf; Chemie Lexikon; 2.Aufl.; Frankh'sche Verlagshandlung; Stuttgart; 1950; S. 940ff.

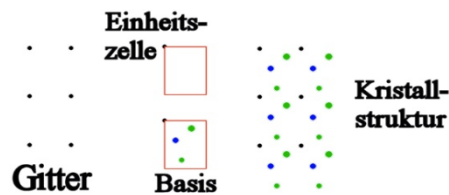
-Ulrich Möller, Anorganische Strukturchemie; 6., aktualisierte Auflage, Vieweg+Teubner, 2008

# Gitterstruktur

D. Stephan und A. Huber

## Definition:

Im Allgemeinen bestehen Kristalle aus einem homogenen Muster, welches durch eine dreidimensionale Anordnung von Punkten im Raum definiert ist. Diese beruhen auf mathematischen Gesetzmäßigkeiten und beeinflussen die physikalischen Eigenschaften der Kristalle. Die Elementarzelle ist dabei die kleinste sich periodisch wiederholende Einheit eines Gitters. Sie enthält alle Informationen, die zur Beschreibung eines Kristalls erforderlich sind. Durch Translationsymmetrie wird die Elementarzelle zu einem dreidimensionalen Netz erweitert. Die verschiedenen Zellenformen werden im dreidimensionalen Raum durch die 14-Bravais-Gitter beschrieben. D.h. durch die Gitterstruktur und die Basis wird die Kristallstruktur definiert.



## Bestimmungsmethode

Zur Untersuchung des Kristallgitters wird die Röntgenstrukturanalyse oder Röntgenbeugung (XRD → X-Ray Diffraction) verwendet. Hierbei wird die untersuchende Substanz mit Röntgenstrahlung beschossen. Trifft die Strahlung auf die Elektronenhülle der Atome, so wird die Strahlung abgelenkt. Die aufgenommenen Beugungsmuster, welche sich aus den Wechselwirkungen von Strahlung mit den Elektronen ergeben, dienen zur Strukturbestimmung. D.h. durch bestimmen der Elektronenverteilung in der Elementarzelle und der Winkel, unter denen die Beugungsmaxima auftreten, kann die Geometrie abgeleitet werden.

## Debye-Scherrer-Verfahren

Hierbei wird eine Probe aus pulverisiertem, kristallinem Material mit feinen monochromatischen Röntgenstrahlbündel beschossen. Trifft die Röntgenstrahlung auf ein kristallines Teilchen der Probe gerade so, dass die Bragg-Gleichung erfüllt ist, werden sie optimal gebeugt und erzeugen mit den anderen optimal gebeugten Strahlen einer Gitterebene ein kreisförmiges Kegel-Muster auf einem fotografischen Film. Durch Rotation können so für alle Gitterebenen die Kegel-Muster aufgenommen werden.

## Laue-Verfahren

Ein Einkristall wird polychromatischer Röntgenstrahlung ausgesetzt. Die erhaltenen punktförmigen Reflexe werden auf einem fotografischen Film festgehalten. Das Laue-Verfahren wird zur Untersuchung von dynamischen Prozessen verwendet (z.B. Proteinkristallen). Nachteil bei diesem Verfahren ist, dass man nicht bestimmen kann, welcher Reflex zu welcher Wellenlänge gehört.

## Quellen:

RÖMPP Chemie Lexikon  
[www.wikipedia.de](http://www.wikipedia.de)

# Magnetstruktur

Janina Jaspers und Benjamin Lucke

## 1. Grundlagen

### **Magnetfeld:**

Ein Magnetfeld kann durch zwei Größen beschrieben werden. Zum einen durch die magnetische Flussdichte  $B$  mit der Einheit Tesla ( $\frac{Vs}{m^2}$ ) und zum anderen durch die magnetische Feldstärke  $H$  mit der Einheit  $\frac{A}{m}$ . Einen Zusammenhang kann man mit folgender Formel ausdrücken:

$$B = \mu_0 \cdot H$$

Wobei diese Formel nur im Vakuum gilt.

### **Magnetische Stoffe:**

Das magnetische Verhalten von Stoffen wird prinzipiell durch zwei stoffspezifische Größen festgelegt:

a) *Die magnetische Permeabilität  $\mu$*

Die magnetische Permeabilität gibt die Durchlässigkeit eines Stoffes für die magnetischen Feldlinien an. Oder anders ausgedrückt, ist sie das Verhältnis der magnetischen Flussdichte  $B$  zur magnetischen Feldstärke  $H$ .

Die Permeabilitätszahl ist außerdem ein Proportionalitätsfaktor der äußeren und inneren Flussdichte eines Körpers, wenn dieser sich in einem homogenen Magnetfeld befindet.

b) *Die Suszeptibilität  $\chi$*

Aus den vorher erklärten unterschiedlichen Flussdichten eines Körpers entsteht eine Differenz, die man magnetische Polarisation nennt. Hier gilt die Formel:

$$\Delta B = \chi \cdot B_{\text{außen}}$$

$\chi$  ist hier also eine stoffspezifische Konstante, die man als magnetische Suszeptibilität bezeichnet. Allgemein gibt sie an, in wie weit sich ein Stoff magnetisieren lässt bzw. selbst magnetische Eigenschaften annimmt.

## 2. Magnetstruktur:

Hauptsächlich wird die Magnetstruktur eines Atoms bzw. eines Moleküls durch seine Elektronenhülle bestimmt. Dabei werden jedem Elektron ein Drehimpuls  $I$  und ein Spin  $s$  zugeordnet. Dadurch rotiert das Teilchen und es ergibt sich ein magnetisches Moment. Das resultierende Moment bewirkt dementsprechend eine magnetische Struktur des Stoffes.

In Feststoffen kann man unter fünf verschiedenen Typen von Magnetismus unterscheiden:

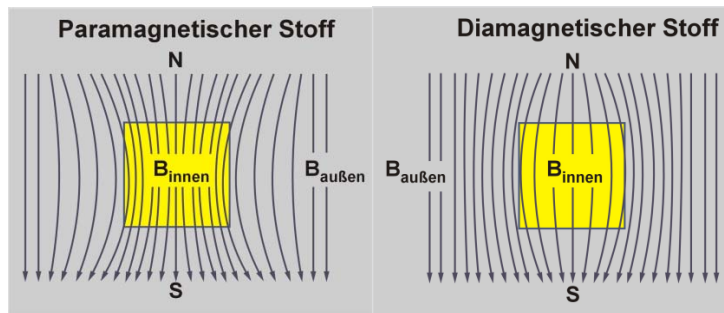
### **Diamagnetismus:**

Bringt man einen Stoff ein Magnetfeld, so werden in den Molekülorbitalen des Stoffes elektrische Ströme induziert, die denen des äußeren Magnetfeldes entgegen gerichtet sind, was eine Abstoßung des diamagnetischen Stoffes vom Magnetfeld bewirkt. Diamagnetismus findet man bei Stoffen, die keine ungepaarten Elektronen besitzen.

### **Paramagnetismus:**

Der Paramagnetismus ist so zu sagen das Gegenteil des Diamagnetismus. Dieser liegt vor, wenn ein Stoff ungepaarte Elektronen in seinen Schalen aufweist. Wirkt dann ein äußeres Magnetfeld auf ihn ein, so sind die magnetischen Momente der Elektronen dem Magnetfeld gleichgerichtet. Er wird so in das Magnetfeld hineingezogen

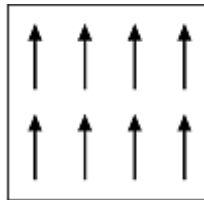




### ***Ferromagnetismus:***

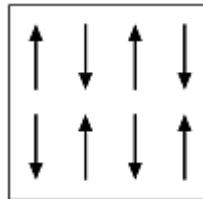
Wenn ein ferromagnetischer Stoff in ein Magnetfeld gelangt, richten sich die magnetischen Momente alle spontan in eine Richtung aus. Dies geschieht nicht im ganzen Stoff sondern nur in den weiss'schen Bezirken.

Dadurch entstehen zwei magnetische Pole, die denen des Magnetfeldes entgegen gerichtet sind. Dieser Stoff verhält sich dann selbst wie ein Magnet, jedoch nur so lange, wie das äußere Magnetfeld einwirkt. Ein Beispiel hierfür wäre Eisen.



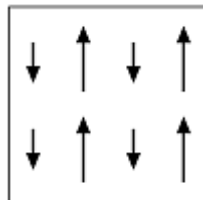
### ***Antiferromagnetismus:***

Bei Einwirkung eines äußeren Magnetfeldes auf antiferromagnetische Stoffe ordnen sich die magnetischen Momente in den weiss'schen Bezirken entgegengesetzt zueinander aus. Diese Stoffe verhalten sich dadurch nicht magnetisch. Ein Beispiel wäre hierfür Mangan(II)oxid.



### ***Ferrimagnetismus:***

Ferrimagnetismus tritt in Verbindungen auf, die zwei verschiedene Kationen enthalten, die voneinander unterschiedliche magnetische Momente haben. Diese magnetischen Momente richten sich bei Einwirkung eines Magnetfeldes entgegengesetzt aus. Dabei können aber die magnetischen Momente der kleineren Kationen die der größeren Kationen nicht kompensieren, wodurch solche Stoffe als Permanentmagnete in Erscheinung treten. Ein Beispiel hierfür wäre Magnetit,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ .



## **3. Bestimmungsmethoden:**

### ***Messung der magnetischen Eigenschaften mit der Gouy-Magnetwaage:***

Bei der Methode nach Gouy befindet sich eine Probe teils im Zentrum zwischen zwei Magneten, die ein homogenes Magnetfeld erzeugen, teils weit außerhalb des homogenen Feldes, wo die Feldwirkung gegen Null geht. Ist diese Probe ein rein diamagnetischer Stoff so wird er abgestoßen und der Zeiger des Messgerätes schlägt nach rechts aus. Wird ein paramagnetischer Stoff als Probe verwendet wird er angezogen und der Zeiger schlägt in die andere Richtung aus. Mit dieser Waage kann man also feststellen, ob die Probe einen High-Spin oder Low-Spin-Zustand einnimmt.

Außerdem kann an der Intensität des Zeigerausschlages die Anzahl der ungepaarten Elektronen bestimmt werden.

**Neutronenbeugung:**

Eine weitere Bestimmungsmethode ist die Neutronenbeugung.

Nach de Broglie besitzen auch Teilchen Wellenlängen und können daher gebeugt werden. Die Wellenlänge von Neutronen liegt in etwa im Bereich von Atomabständen im Kristall, man kann daher Neutronenstrahlung zur Strukturuntersuchung von Festkörpern verwenden. Anders als bei der Röntgenbeugung werden die Neutronen am Kern gestreut. Sie durchdringen die Elektronenhülle und treten durch die starke Kernkraft, die den Atomkern zusammenhält mit dem Kern in Wechselwirkung, Daher ist es z.B. möglich, anders als in der Röntgenbeugung, bereits benachbarte Elemente wunderbar zu unterscheiden.

Durch den Spin, den die Neutronen aufweisen können diese auch mit den resultierenden magnetischen Feldern in der Elektronenhülle wechselwirken, was das Beugungsmuster verändert. Man kann daher durch die Neutronenbeugung Rückschluss auf die magnetische Ordnung des Kristalls ziehen. Da die magnetische Wechselwirkung erst ab der Curie- bzw. Néel-Temperatur im Beugungsdiagramm sichtbar ist, lassen sich diese Temperaturen über die Neutronenbeugung bestimmen.

# Konstitution, Konfiguration und Konformation

Violetta Quiring (833293) und Manuel Roesener (832498)

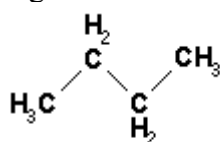
## Konstitution

Die Konstitution gibt die grundlegenden Bindungsverhältnisse in einem Molekül an.

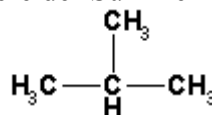
Sie gibt also Aufschluss über Art und Menge der Bindungen zwischen den Atomen.

Konstitutionsisomere kommen dann zustande wenn zwei Verbindungen dieselbe Summenformel aber unterschiedliche Strukturformeln aufweisen.

Die Abbildung zeigt zwei mögliche Konstitutionsisomere der Summenformel  $C_4H_{10}$ :



n-Butan



2-Methyl-propan

Als Bestimmungsmethoden für die Konstitution eines Moleküls eignen sich die NMR-Spektroskopie und die Röntgenstrukturanalyse.

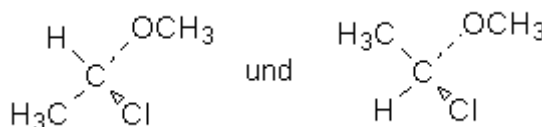
Die NMR-Spektroskopie ist eine spektroskopische Methode, die die Untersuchung der elektronischen Umgebung einzelner Atome und ihrer Wechselwirkungen mit Nachbaratomen ermöglicht. Dazu nutzt sie die Absorption elektromagnetischer Strahlung im Hochfrequenzbereich (4MHz-600MHz) durch Atomkerne, deren Energiezustände mithilfe eines starken Magnetfeldes aufgespalten sind.

Bei der Röntgenstrukturanalyse wird die Struktur eines Kristalls bestimmt, in dem die Beugungsmuster von monochromatischer Röntgenstrahlung am Kristallgitter untersucht werden.

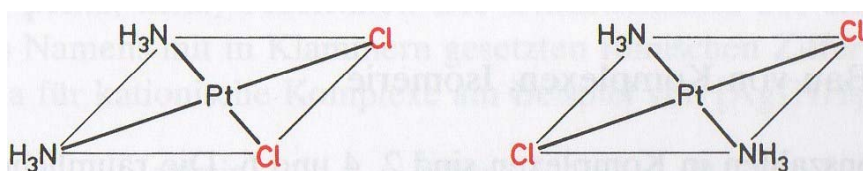
## Konfiguration

Die Konfiguration gibt die räumliche Anordnung der Atome eines Moleküls (also den räumlichen Bau des Moleküls) an, wobei Drehungen um Einfachbindungen nicht berücksichtigt werden (siehe Konformation). Konfigurationsisomere kommen sowohl bei anorganischen Komplexen als auch bei organischen Molekülen vor.

Zwei Moleküle oder Komplexe besitzen dann eine unterschiedliche Konfiguration (sind also Konfigurationsisomere), wenn sie durch Drehungen um Einfachbindungen nicht zur Deckung gebracht werden können. Verhalten sich die beiden Isomere wie Bild und Spiegelbild, so spricht man von Enantiomeren.



Methyl-1-Chlorethylether (R- und S- Enantiomere)



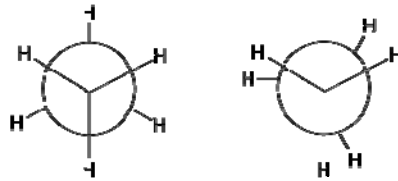
$PtCl_2(NH_3)_2$  Komplex (cis- und trans- Isomere)

Bei bekannter Konstitution können cis-trans-Isomere durch ihre unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften identifiziert werden. Enantiomere können nur mithilfe der Röntgenstrukturanalyse identifiziert werden.

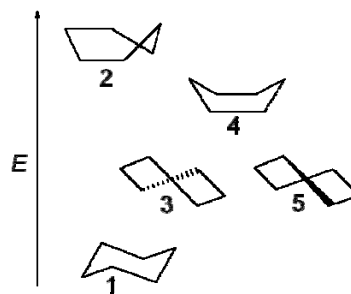
## Konformation

Die Konformation beschreibt die räumliche Anordnung aller drehbaren Bindungen eines Moleküls. Sie enthält somit auch die Informationen der Konstitution und der Konfiguration und kann dazu verwendet werden die Raumkoordinaten eines Moleküls vollständig anzugeben.

Moleküle mit gleicher Konstitution, die sich in der spezifischen Anordnung der Atome unterscheiden, aber alle in einem Energieminimum liegen werden Konformere genannt, sind also Konformationsisomere. Konformere lassen sich generell nicht isolieren aber bei sehr tiefen Temperaturen spektroskopisch nachweisen.



gestaffelte und ekliptische Konformation des Ethans



Verschiedene Konformere des Cyclohexans und ihre Energien

## Quellen:

- Riedel/Janiak Anorganische Chemie 7. Auflage
- Skoog/Leary Instrumentelle Analytik
- Vollhardt/Shore Organische Chemie 4. Auflage
- Wikipedia.de
- Chempage.de