

SCHEIKUNDE

H1: CHEMIE EN MATERIE

1.2 MATERIE

Materie wordt gekenmerkt door een massa en een volume.

→ onderverdeeld naargelang fysische toestand of naargelang samenstelling

1.2.1 3 fysische toestanden (aggregatietoestanden)

1. vast (v, s)
 - deeltjes op vaste roosterplaatsen (→ veranderen niet t.o.v. elkaar)
 - eigen volume
 - eigen vorm

 - Kristallijn: regelmatig patroon
 - Amorf: geen regelmaat in opbouw
2. vloeibaar (vl, l)
 - deeltjes bewegen t.o.v. elkaar
 - kleine afstanden
 - eigen volume
 - geen eigen vorm
3. gasvormig (g)
 - deeltjes bewegen t.o.v. elkaar
 - grote afstanden
 - geen eigen volume
 - geen eigen vorm

⇒ samendrukbaar

1.2.2 Samenstelling van materie

= soorten en aantallen stoffen die de materie vormen

Materie is meestal een *mengsel* van verschillende componenten.

Variabele samenstelling → variabele eigenschappen.

- heterogeen mengsel: zichtbare fasegrenzen bv. stukken rots
- homogeen mengsel: geen zichtbare fasegrenzen bv. lucht
 - gemengd onder hun kleinste individuele vorm: atomen, ionen, moleculen
 - oplossing

Mengsels kunnen worden gescheiden in zuivere stoffen via fysische scheidingstechnieken

- filtreren, zeven → verschil in deeltjesgrootte
- decanteren → verschil in dichtheid
- adsorptie → verschil in adsorberend vermogen
 - o sommige stoffen blijven beter plakken aan het adsorbent)
- destilleren, uitkristaliseren → verschil in kookpunt
- extraheren → verschil in oplosbaarheid

Fysische scheidingsmethoden leveren *zuivere stoffen*

- constante samenstelling
- vaste eigenschappen
- één soort deeltjes of eenheden: H_2O (water), $CaCO_3$ (kalk), Cu (koper), ...

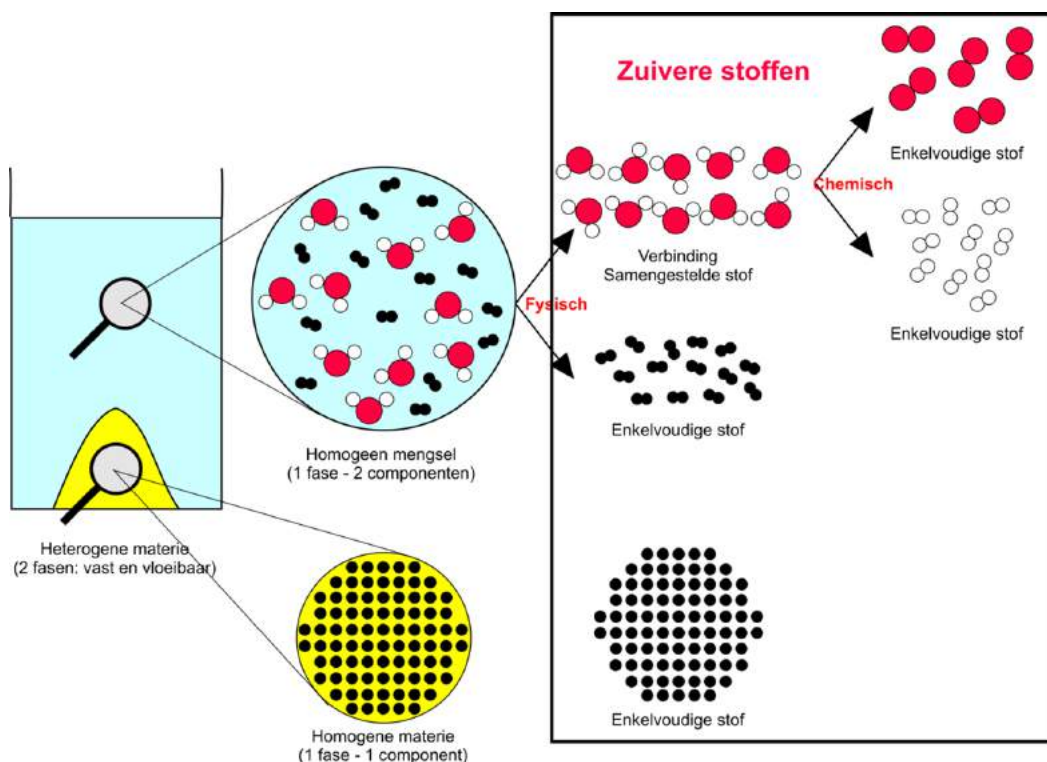
Zuivere stoffen kunnen soms verder worden opgesplitst in andere zuivere stoffen

(Chemische methoden: stoffen veranderen!!)

bv. elektrolyse van water ($H_2O \rightarrow H_2 + O_2$) door elektrische stroom

- Verbinding / samengestelde stof:
kan via chemische methoden nog verder ontbonden worden. Bevat minstens twee verschillende elementen. Water, ammoniak.
- Elementaire of enkelvoudige stof:
kan niet verder ontbonden worden. Aluminium, diamant, kwik. Kan meerdere atomen bevatten (bv. O_2 ijzer)

classificatie van materie:



Opmerking:

- verbinding
= stof die tot stand komt door chemische binding van 2 of meer verschillende elementen in een vaste verhouding: NaCl, CH₄
- molecule
= verzameling van tenminste 2 atomen waartussen een covalente binding tot stand kwam.
⇒ de kleinste eenheid vd stof waarin nog alle representatieve in een welbepaalde verhouding voorkomen.
⇒ formule-eenheid: eenheid voor verbindingen gevormd uit ionen
- enkelvoudige stof
= bevat slechts 1 soort atomen

1.3 Fysische en chemische omzettingen

- Fysische omzettingen
→ stof verandert niet, toestand kan wel wijzigen
→ alleen de aggregatietoestand of de kristalstructuur verandert
→ de identiteit vd stof verandert niet
(bv. water ⇒ ijs)
- Chemische omzetting
→ samenstelling van de stof verandert
→ omzetting tot 1 of meerdere andere stoffen met een andere chemische samenstelling en andere fysische eigenschappen
(bv. roesten ijzer)

Fysische en chemische eigenschappen

- Fysische eigenschappen meten, bepalen verandert de stof niet.
(smeltpunt, kookpunt, kleur, brekingsindex, vluchtigheid,...)
- Chemische eigenschappen meten, bepalen leidt tot omzetting van de stof
(corrosiegevoeligheid, brandbaarheid, ...)
- extensieve eigenschappen: afhankelijk van de stofhoeveelheid
(bv. volume, massa, ...)
- intensieve eigenschappen: onafhankelijk van de stofhoeveelheid
(bv. temperatuur, kleur, ...)

1.4 Energie

Fysische en chemische processen: overdracht/omzetting van energie.

Een systeem bezit energie (= mogelijkheid om arbeid te leveren)

- **kinetische energie:** bewegingsenergie
→ temperatuur is een maat voor zn kinetische energie
- **potentiële energie:** relatieve positie en interacties van deeltjes t.o.v. andere deeltjes
- **energie** = capaciteit om arbeid te leveren of warmte over te dragen
- **arbeid** = effect van kracht op een verplaatsing
- totale energie in een systeem = potentiële energie + kinetische energie

! Wet van behoud van energie (Lavoisier): energie kan niet worden gevormd, noch vernietigd.

1.5 Grootheden en eenheden

lengte	meter	m
massa	kilogram	kg
tijd	seconde	s
temperatuur	kelvin	K
stofhoeveelheid	mol	mol

3 temperatuurschalen:

Celsiuschaal:

0°C	100°C
32°F	212°F
273,15 K	373,15 K

Omzetting van Kelvin naar Celsius: $T = t + 273,15 \text{ K}$

H2: ATOOMTHEORIE

2.1 Atoomtheorie van Dalton

Lavoisier: Wet van behoud van massa:

→ in een gesloten systeem blijft de massa constant

Proust: Wet vd constante samenstelling

→ Een zuivere stof bevat steeds dezelfde elementen in dezelfde massaverhouding

Atoomtheorie van Dalton:

- Elementen zijn opgebouwd uit kleine, ondeelbare en niet-vernietigbare deeltjes: atomen.
- Atomen van een bepaald element zijn identiek in massa en in andere eigenschappen en verschillen van de atomen van andere elementen
- Verbinding: combinatie van twee of meer verschillende atoomsoorten in een vaste en constante verhouding
- Chemische reactie: reorganisatie van atomen. Atomen zelf veranderen niet tijdens een chemische reactie

Dalton: Wet vd veelvuldige verhoudingen

→ Wanneer 2 elementen A en B combineren om meer dan 1 verbinding te vormen zullen de massa's van B die reageren met een vaste hoeveelheid A zich altijd tot elkaar verhouden als verhoudingen van kleine gehele getallen

bv.

zwavel en zuurstof vormen 2 verschillende verbindingen:

massa zuurstof die reageert met 1000g zwavel met vorming van:

verbinding I	1000g
verbinding II	1500g

$$\frac{I}{II} = \frac{1000}{1500} = \frac{2}{3} \Rightarrow \text{massa's zuurstof in deze verbinding verhouden zich als kleine gehele getallen}$$

2.2 Het nucleaire atoommodel

- **Dalton:** stoffen bestaan uit atomen, kleine ondeelbare deeltjes met specifieke eigenschappen. Deze deeltjes kunnen niet gevormd, noch vernietigd worden.
- **Thomson:plumpuddingmodel:** atomen bevatten beweegbare elektronen, deeltjes met een negatieve lading
- **Rutherford:nucleaire atoommodel:** de massa van een atoom is geconcentreerd in de positieve kern, de elektronen bewegen hierrond en bepalen de afmetingen van het deeltje. De positieve deeltjes in de kern noemt men protonen
aangezien een atoom elektrisch neutraal is: # elektronen=#protonen
- **Chadwick:** naast protonen bevat de kern neutrale deeltjes, die men neutronen noemt. Ze hebben ongeveer dezelfde massa als protonen.
nucleonen= protonen en neutronen

2.2.2 Het nucleaire atoom

massa en lading van subatomaire deeltjes					
Deeltje	Massa			Lading	
	Absoluut (kg)	Absoluut (u)	Relatief	Absoluut (C)	Relatief
Elektron	$9,11 \cdot 10^{-31}$	0,000555	0,000 555	$-1,6022 \cdot 10^{-19}$	-1
Proton	$1,672 62 \cdot 10^{-27}$	1,00727	1,007 27	$+ 1,6022 \cdot 10^{-19}$	+1
Neutron	$1,674 93 \cdot 10^{-27}$	1,00866	1,008 66	0	0

atoommassa-eenheid: u

= 1/12e vd massa ve koolstofatoom dat 6 protonen en 6 neutronen bevat

quarks

→ protonen en neutronen bestaan uit nog kleinere subatomaire deeltjes

2.2.3 Atoomsymbolen

Elk neutraal individueel atoom = nuclide:

- vast aantal protonen in de kern
- zelfde aantal elektronen rond de kern
- in kern: welbepaald aantal ongeladen neutronen.



A: (atoom)massagetal = som van aantal protonen en neutronen (niet te vinden in periodiek systeem)

Z: atoomnummer = aantal protonen=aantal elektronen

→ bepaald de identiteit ve atoom

X: (element)symbool

2.2.: Isotopen

→ verschillend aantal neutronen (verschillend massagetal)

→ nucliden v/h zelfde element met eenzelfde aantal protonen maar verschillend aantal neutronen

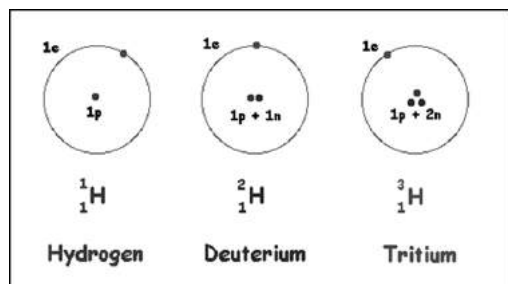
Voor de gegeven element is de relatieve hoeveelheid van de verschillende isotopen constant = abundantie/ natuurlijk voorkomen

bv. Ne : 90,48 % van de atomen 10 neutronen,

0,27 % van de atomen 11 neutronen

9,25 % van de atomen 12 neutronen

! isotopen van H: 1 proton; 0,1 of 2 neutronen



2.2.5 Atoommassa: atoommassa-eenheid

Atoommassa-eenheid: 1u

^{12}C -nuclide = 12 atoommassa-eenheden = 12 u

$$1\text{u} = \frac{1}{12} \text{ (absolute massa van } ^{12}\text{C)} \\ = 1,66056520 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

De relatieve atoommassa (A_r) van een nuclide: onbenoemd:

$$A_r = \frac{\text{(absolute massa van X (in g))}}{\frac{1}{12} \text{(absolute massa van } ^{12}\text{C (in g))}} \\ = \frac{\text{(absolute massa van X (in g))}}{1,66056520 \times 10^{-27} \text{ kg}}$$

Atoommassa van een element: gewogen gemiddelde van de in de natuur voorkomende isotopen van dat element. ⇒ want isotopmengsels in de natuur

Komt in natuur voor als	massa :		% abundantie	Atoommassa
^{12}C	12,00 u	x	98,89 %	= 11,867 u
^{13}C	13,0034u	x	1,11%	= 0,143 u
				12,01 u

2.2.6 Ionen

“normaal”: een atoom is elektrisch neutraal $\rightarrow$ aantal protonen = aantal elektronen

Meeste atomen zijn op zich niet stabiel en zullen via reacties enkelvoudige stoffen en/of verbindingen vormen. Sommige atomen nemen hierbij elektronen op / geven elektronen af met vorming van IONEN.

- kation: positief ion
- anion: negatief ion

2.3 Periodiek systeem

→ geordende voorstelling van de gekende elementen.

- gerangschikt volgens stijgend atoomnummer (waarde Z)
- van links naar rechts in periode (rij)
- én zo dat elementen die op een gelijkaardige manier reageren in dezelfde groep (kolom) staan

1	1,2,13-18: hoofdgroep-elementen																18	
la																	0	
1	2	3-12: transitie-elementen										13	14	15	16	17	2	
H	Ila	Lanth.+act.:binnenste transitie-elem.										IIla	IVa	Va	VIa	VIIa	He	
2	3	4											5	6	7	8	9	10
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
3	11	12	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Na	Mg	IIlb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb	VIIIb	VIIIb	IIb			Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn		Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd		In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	55	56		72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg		Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	87	88	**	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn		Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
*Lanthaniden	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
**Actiniden	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Alkalimetalen

Aardalkalimetalen

Transitiemetalen

Hoofdgroepmetalen

Metalloïden

Niet-metalen

Halogenen

Edelgassen

Lanthaniden

Actiniden

Kation = minder elektronen dan protonen : positieve lading

Anion = meer elektronen dan protonen : negatieve lading

1A	2A							3A	4A	5A	6A	7A	8A
H ⁺													
Li ⁺										N ³⁻	O ²⁻	F ⁻	EDELGASSEN
Na ⁺	Mg ²⁺							Al ³⁺			S ²⁻	Cl ⁻	
K ⁺	Ca ²⁺										Se ²⁻	Br ⁻	
Rb ⁺	Sr ²⁺										Te ²⁻	I ⁻	
Cs ⁺	Ba ²⁺												

Metalloïden: grenselementen: halfgeleiders

Hoofdgroepmetaal:

→ neiging om elektronen af te staan

→ hierbij een kation vormend met hetzelfde # elektronen als het dichtsbijzind edelgas

Niet-metaal:

→ neiging om elektronen op te nemen

→ hierbij een anion vormend met hetzelfde # elektronen als het dichtsbijzind edelgas

2.4 Molaire massa

1 mol = hoeveelheid stof die exact evenveel deeltjes bevat als aanwezig zijn in exact 12,0000 g zuiver ¹²C.

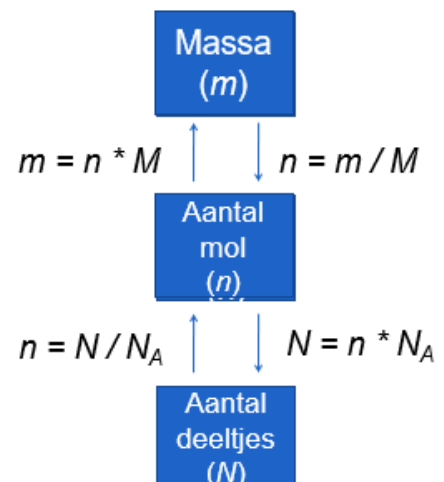
De mol wordt gedefinieerd als de hoeveelheid stof die exact $6,022\,140\,76 \times 10^{23}$ deeltjes bevat = getal van Avogadro (N_A).

M = molaire massa

→ getalwaarde van z'n Ar → $\frac{g}{mol}$

n = aantal mol = stofhoeveelheid → $\frac{m(g)}{M(g/mol)}$

N = aantal deeltjes



Hoofdstuk 2: atoomtheorie

H3: MOLECULEN EN IONEN

Inleiding

elementen $\xrightarrow{\Delta \text{ eigenschappen}}$ verbindingen

Enige elementen die stabiel zijn als atoom: edelgassen: mono-atomisch; Ne, He,...
→ alle andere atomen komen voor als enkelvoudige stoffen of verbindingen.

Chemische bindingen

= krachten die de atomen in een verbinding bij elkaar houden

= minstens 2 atomen die door krachten bij elkaar gehouden worden

Diatomisch: Moleculen: H_2 , O_2 , Cl_2 vs. Polyatomisch: P_4 , S_8 , ..
→ Netwerk(kristal), metaalrooster
bv. diamant, grafiet, koper,...

Verbindingen:

combinatie van minstens 2 verschillende elementen in een constante verhouding (wet van Proust).

Covalente bindingen:

→ elektronen worden gedeeld

→ atomen plaatsen elektronen gemeenschappelijk

→ resulterende deeltjes: moleculen (moleculaire binding)

Ionaire bindingen:

→ overdracht van elektronen tussen de atomen

→ tussen metalen en niet-metalen

positief negatief

→ vorming van kristalroosters

→ coulombinteracties (zouten)

Metaalbinding:

→ in metalen; een totaal verschillende bindingstoestand

3.1 Chemische formules en molecuulmodellen

minimale/ empirische formule

= verhouding vd aantallen van verschillende elementen, uitgedrukt in de kleinste gehele getallen

molecuulformule

= juiste samenstelling vd molecule; na elk vd samenstellende atomen het werkelijk aantal atomen per molecule geven

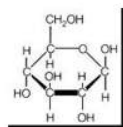
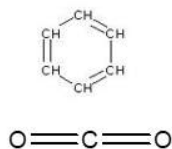
structuurformule

= geometrische voorstelling vd formule

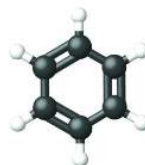
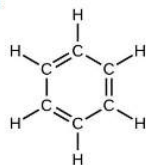
bv. Benzeen:

- minimale of empirische formule: CH
- (molecuul)formule: C_6H_6
- structuurformule:

bij glucose: CH_2O
 $C_6H_{12}O_6$



Benzeen



1. structuurformule
2. bol-staafmodel
3. ruimte-vullend model

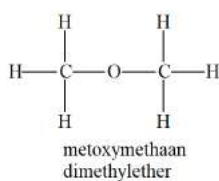
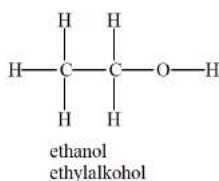
Isomeren (organische chemie)

= stoffen met dezelfde soorten atomen en hetzelfde aantal atomen die op verschillende manieren aan elkaar gebonden zijn.

Structuurisomeren

→ dezelfde molecuulformule, maar een verschillende structuurformule

bv. C_2H_6O



3.2 Ionverbindingen

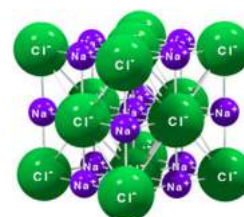
= zouten!!!

ION-BINDING:

positieve en negatieve lading trekken elkaar aan → elektrostatische coulombkrachten

bv. NaCl

- Na geeft 1 elektron af (kation) → wordt positief (metaal)
- Cl neemt 1 elektron op (anion) → wordt negatief (niet-metaal)
- positieve en negatieve lading trekken elkaar aan
→ elektrostatische coulombkrachten ⇒ ION-BINDING



Niet 1 Cl met 1 Na maar enorm veel van elk ⇒ kristalrooster

Formule-eenheid

= de minimale formule voor een ionverbinding

= kleinste elektrisch neutrale combinatie van anionen en kationen in een ionverbinding

(bv. N_2S , H_2O , ...)

Wet van elektroneutraliteit

→ som van positieve ladingen in de stof = aan de som van de negatieve ladingen

tip!! een anion is altijd het niet-metaal

mono-atomische ionen vs.

Polyatomische ionen: groep van twee of meer atomen die covalent aan elkaar gebonden zijn, maar in hun geheel een lading dragen.

bv. bleekwater = natriumhypochloriet: NaOCl in water

→ Na^+ : kation

→ OCl^- : polyatomisch anion

vanbuiten!!!

carbonation	CO_3^{2-}
nitraation	NO_3^-
sulfaation	SO_4^{2-}
fosfaation	PO_4^{3-}
ammoniumion	NH_4^+

Formule-eenheid

= de minimale formule voor een ionverbinding

= kleinste elektrisch neutrale combinatie van anionen en kationen in een ionverbinding

(bv. N_2S , H_2O , ...)

Wet van elektroneutraliteit

→ som van positieve ladingen in de stof = aan de som van de negatieve ladingen

!!tip: een anion is altijd het niet-metaal

3.3 Andere bindingsvormen

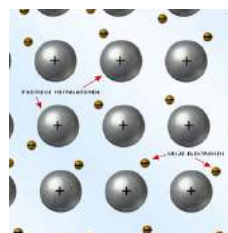
Netwerkkristallen: covalente binding tussen enorm veel atomen.

- Formule = minimale formule.
- bv. Grafiet: C

Metaalbinding

elektronen gemeenschappelijk aan het hele rooster

- Formule = symbool metaal
- bv. Al, Fe, ...



Covalente bindingen: elektronen behoren tot de 2 atomen

Metaalbindingen: elektronen gemeenschappelijk aan het hele rooster

3.4 (Relatieve) molecuulmassa, formulemassa

$$\begin{aligned} \text{relatieve molecuulmassa} = M_r &= \frac{(\text{absolute massa van de molecule (in g)})}{\frac{1}{12} (\text{absolute massa van } ^{12}\text{C (in g)})} \\ &= \frac{(\text{absolute massa van X (in g)})}{1,66056520 \times 10^{-27} \text{ kg}} \end{aligned}$$

- Varieert tussen 2 (waterstofgas) en enkele miljoenen (polymeren)
- M_r wordt berekend uit A_r van de samenstellende atomen

voor ionverbindingen:

relatieve formulemassa (M_r) = som A_r samenstellende ionen

3.5 Molaire massa van een verbinding (M)

De massa van één mol van een verbinding = numerieke waarde van M_r in g

- $M_r \rightarrow$ zonder eenheid
- $M \rightarrow$ eenheid: g/mol

$\rightarrow$ zelfde getal!!!

3.6 Samenstelling van verbindingen

$\rightarrow$ Procentuele samenstelling

= massa van elk element in 100 g van de verbinding $\rightarrow$ constant

$$\text{massa-\% X} = \frac{\text{massa X in 1 mol vd verbinding}}{\text{massa van 1 mol verbinding}} \times 100\%$$

H4: STOICHIOMETRIE

4.1 Algemeen

- Chemische verandering: reorganisatie van atomen in 1 of meerdere stoffen
- Chemische reactie: proces waarin 1 of meerdere uitgangspunten omgezet worden in andere stoffen
- Reactievergelijking: schematische voorstelling van deze reorganisatie

reagentia → reactieproducten

- Coëfficiënt of voorgetal: materie kan niet gecreëerd, noch vernietigd worden
 - o voorgetallen staan voor hoeveel mol er reageert
 - o minimum # vereiste atomen en moluculen; ook een veelvoud ervan
- Aggregatietoestanden: g, l (vl), s (v), aq
 - o aq = opgelost in water

4.2 Berekeningen en toepassingen

verbranding → reactie met zuurstofgas

ontbinding → stof valt uit 1 in andere stoffen

4.3 Beperkend reagens

Meerdere uitgangsstoffen: de mogelijkheid bestaat dat één van de reagentia in niet voldoende mate aanwezig is om de ander volledig te laten reageren

Beperkend reagens

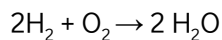
= het reagens dat, volgens de reactievergelijking, in de kleinste mate aanwezig is bepaalt hoeveel eindproduct in die gegeven omstandigheden maximaal aanwezig kan bekomen worden.

→ bepaalt de theoretische opbrengst vd reactie

VS. andere reagens in overmaat

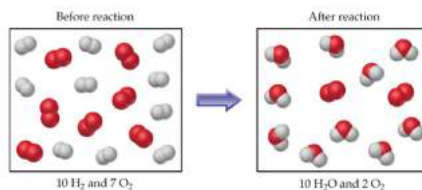
op basis vd werkelijke opbrengst en de theoretische opbrengst ⇒ procentuele opbrengst bepalen

vb. :



→ O_2 in overmaat

→ H_2 beperkend reagens



Beperkt reagens bepaalt hoeveel reactieproducten er gevormd worden.

theoretische opbrengst

→ de hoeveelheid product die, onder de gegeven omstandigheden, maximaal kan gevormd worden.

procentuele opbrengst = $\frac{\text{werkelijke opbrengst}}{\text{theoretische opbrengst}} \times 100\%$

→ ook procentueel rendement

! Ammoniak: NH_3

H5: OPLOSSINGEN

5.1 Samenstelling van oplossingen

oplossing = oplosmiddel + opgeloste stof = homogeen mengsel van twee of meer stoffen

- oplosmiddel = meerderheidscomponent
- opgeloste stof = minderheidscomponent

Eigenschappen:

- homogene verdeling en op moleculaire schaal: relatieve hoeveelheid van de componenten is constant doorheen het volledige systeem
- scheiden: enkel door fysische scheidingsmethoden (destilleren, uitdampen, chromatografie,...) → niet spontaan of dmv filtreren
- samenstelling: variabel (vloeistof/vloeistof soms slechts in beperkte verhouding mengbaar)
- gasmengsel, vloeibare homogene oplossingen: transparant (niet troebel)

concentratie

= relatieve hoeveelheid opgeloste stof/oplosmiddel

= hoev opgeloste stof per eenheid oplosmiddel

- Verdunde oplossing → relatief weinig opgeloste stof per volume-eenheid
- Geconcentreerde oplossing → hoev relatief groot

5.2 Concentratie-uitdrukkingen

5.2.1. Stoffhoeveelheidsconcentratie / molaire concentratie/molariteit c:

$$c = \frac{n}{V} = \frac{n \text{ opgeloste stof}}{V \text{ oplossing (in L)}} \rightarrow (\text{mol/L}) \rightarrow M$$

Opmerkingen:

- temperatuur afhankelijk → geldt enkel bij referentietemperatuur
- geldt voor totaal volume; volume van de oplossing = opgeloste stof + oplosmiddel
- zegt niks over de structuur/ werkelijke samenstelling; geen rekening met dissociatie

5.2.2. Molale concentratie/molaliteit

$$m = \frac{n}{m_{\text{oplosmiddel}}} \quad \text{Molale concentratie } m: (\text{mol/kg})$$

⇒ !! in kg & massa vh oplosmiddel niet de opgeloste stof

→ temperatuur onafhankelijk;

de massa van een stabiele stof verandert niet met de temperatuur, het volume daarentegen wel.

5.2.3 Molfractie

= de verhouding van aantal mol van beschouwde stof op het totaal aantal mol van alle stoffen aanwezig in het mengsel

Molfractie x : $x = \frac{n}{n_{\text{totaal}}}$ → eenheid: onbenoemd

→ temperatuur onafhankelijk

→ som van alle molfracties van alle componenten = 1

5.2.4 Massaconcentratie

Massaconcentratie ρ^* : $\text{massaconcentratie } \rho^* = \frac{\text{massa opgeloste stof}}{\text{volume oplossing}}$

x100: massa-volume-%(m/v%)

= aantal gram opgeloste stof tov 100 ml van het oplosmiddel

5.2.5 Massafractie

= massa van opgeloste stof tov totale massa van oplossing

Massafractie w : $\text{massafractie } w = \frac{\text{massa opgeloste stof}}{\text{massa oplossing}}$

x100: massa-massa-%

= aantal gram opgeloste stof tov 100g van de oplossing

x 1000: massa-massa-%%

x 10^6 : massa-massa-ppm = massa in milligram per kg monster

5.2.6 Volumefractie

$\text{volumefractie} = \frac{\text{volume opgeloste stof}}{\text{volume oplossing}}$

volumefractie φ :

x100: volume-volume-% = aantal ml tov 100 ml van de oplossing vb. alcoholpercentage

x1000: volume-volume-%%

x 10^6 : volume-volume-ppm = massa in milliliter per kiloliter monster

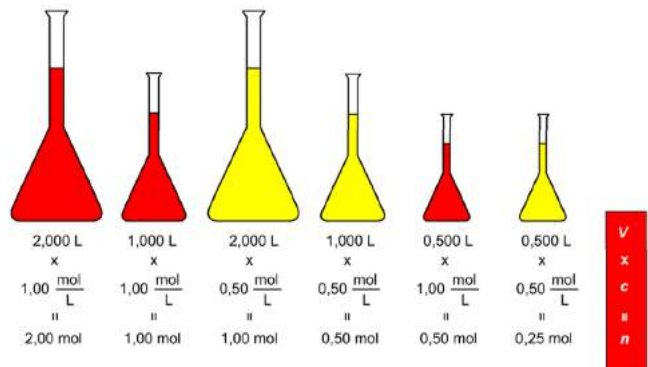
5.2.7 PPM en PPB

ppm = parts per million

ppb = parts per billion

5.3 Praktisch gebruik van concentratieuitdrukkingen

$$n = V \times c$$



Principe van verdunning:

→ verdunning = het toevoegen van oplosmiddel aan een geconcentreerde oplossing



$$c = n/V$$

$$c = n/2V = c/2$$

- oplossingen met een kleine concentratie worden bereid uit een oplossing waarin een grote concentratie opgeloste stof aanwezig is; de stockoplossing (geconcentreerde opl)
- aan een gegeven volume vd stockoplossing wordt oplosmiddel toegevoegd
- aantal mol blijft gelijk, concentratie verandert omdat oplosmiddel wordt toegevoegd

$$\Rightarrow n = c_1 \times V_1$$

$$n = c_2 \times V_2$$

$$\Rightarrow c_1 \times V_1 = c_2 \times V_2$$

Het product = molaire concentratie x volume oplossing

→ geeft steeds het # mol in een bep hoeve oplossing aan

$$\rightarrow n_{\text{opgeloste stof}} = c_1 \times V_1 = c_2 \times V_2$$

5.4 Types waterige oplossingen, oplosbaarheid

Water → veel gebruikt oplosmiddel

5.4.1 Het oplosproces

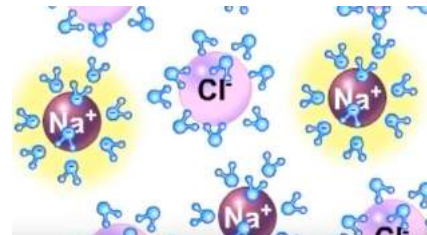
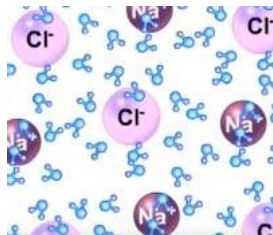
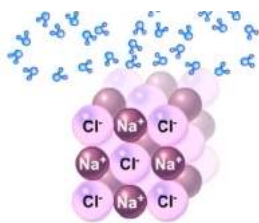
Oplosproces: competitie tussen interacties deeltjes van de stof met

- deeltjes in de stof zelf
- deeltjes oplosmiddel (bv. water) en opgeloste stof

Waarom water heel goed oplosmiddel?

→ door de structuur van de water-molecule

1. water is geen lineair molecuul (hoek van ong. 104°)
2. 1 kant is meer positief dan de andere kant → **polair**
 - zuurstof trekt het elektron meer naar zich toe dan het waterstofatoom ⇒ zuurstof gedeeltelijk negatief, want elektron is negatief
 - elektronegativiteit = maat voor de sterkte waarmee de elektronen in een covalente binding aangetrokken worden door de elektronen in die binding



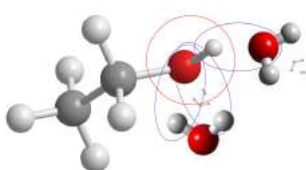
Oplossen NaCl

→ positief Na-ion

→ negatief Cl-ion

1. Water-moleculen (polair) zullen tegen NaCl botsen
2. Water-moleculen zullen met hun positieve kant (kant vd waterstof-atomen) zullen naderen naar het Cl-ion
3. Door die botsingen zal er een overdracht van energie plaatsvinden en zullen de coulomb-krachten tussen Na en Cl verzwakken, het komt beetje los, dus ook hier zullen waterstof-moleculen er zich kunnen tussen "wormen" → dipool-ion interacties
4. Ion-ion binding van het kristal breekt (kost energie)
5. **Hydratatie:** nieuwe interacties tussen moleculen van het oplosmiddel en de ionen (Water-molecule rond de Na- en Cl-ionen)

(Dit kan enkel plaatsvinden door de polariteit van water, als je bv. zout zou oplossen in olie gaat die niet werken, want olie is niet polair.)



Water als oplosmiddel voor **niet-ionaire** stoffen

→ bv. ethanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) in water

“like dissolves like”

- polaire moleculen lossen goed op in polair oplosmiddel (zoals water)
- apolaire moleculen lossen goed op in apolair oplosmiddel

5.4.2 Sterke en zwakke elektrolyten

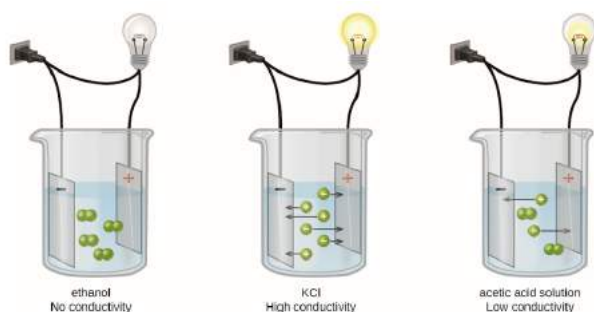
Elektrische geleidbaarheid = vermogen om elektrische stroom te dragen (elektriciteit geleiden)

Elektrolyt: stof die, opgelost in water, de elektrische stroom geleidt door middel van beweging van geladen deeltjes: ionen.

- Sterk elektrolyt: groot geleidingsvermogen per mol ingebrachte elektrolyt (HCl)
→ lamp brandt hard
- Zwak elektrolyt: klein geleidingsvermogen per mol ingebrachte elektrolyt (CH_3COOH)
→ lamp brandt zachtjes
- Niet-elektrolyten: geen geleiding (H_2O)
→ lamp brandt niet

Hoe komt dat elektrolyten leiden tot een toename van het geleidingsvermogen van uw oplossing? → de ionen in rooster komen vrij, komen tussen de watermoleculen. Leg je dan een elektrische spanning aan tussen de 2 staven ⇒ de elektrische ladingen gaan zich bewegen (pos. deeltjes naar de pos. elektroden). Stroom is beweging van elektronen.

!! enkel stroom bij ionen, bij suiker blijft de molecule samen en deze zal dan ook geen stroom geleiden.



5.4.3 Oplosbaarheid van ionverbindingen

Wanneer een sterk elektrolyt?

→ Als alle deeltjes die in de opgeloste stof gaan, opgelost worden

Kan je uit een formule weten of een stof (goed) zal oplossen?

→ Nee, je kan dit enkel via de **oplosbaarheidstabellen**

(Een stof zal goed oplossen als het meer dan 10g/L kan oplossen.)

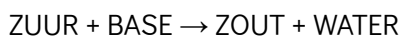
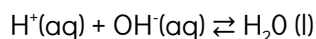
5.5 Neerslagreacties

→ Vooral oefn belangrijk!

5.6 Zuurbase reacties

- **Zuur** volgens Arrhenius: stof die in water H^+ kan afsplitsen
 - o bv. $HCl \rightarrow H^+(aq) + Cl^-(aq)$
 - o sterk zuur → nagenoeg al het zuur dat in oplossing wordt gebracht wordt geïoniseerd
 - o H^+ : werkelijkheid: H_3O^+ (hydroniumion, oxoniumion) (!!! $H^+ = H_3O^+$)
- **Base** volgens Arrhenius: stof die in water OH^- kan afsplitsen
 - o bv. $NaOH \rightarrow Na^+(aq) + OH^-(aq)$
 - o sterke base → nagenoeg heel de base dat in oplossing wordt gebracht wordt geïoniseerd

⇒ **Neutralisatie**: hydroxide-ionen en protonen reageren met vorming van water



Volledige neutralisatie

- evenveel OH^- ionen toegevoegd als H^+ aanwezig was
- evenveel H^+ ionen toegevoegd als OH^- aanwezig was

In zuur-base titraties: onbekende concentratie van een zuur (base) wordt bepaald door toevoegen van een base (zuur) met gekende concentratie.

→ ogenblik waarop hoeveelheden gelijk zijn = equivalentiepunt

bv. We moeten weten wat de concentratie is van een mengsel NaOH.

1. *We voegen mengsel HCl toe waar de concentratie van is geweten*
2. *We voegen zoveel toe tot we het equivalentiepunt hebben bereikt*
3. *We weten dat op dat punt $n_{HCl} = n_{NaOH}$*
4. $\Rightarrow V_{HCl} \times c_{HCl} = V_{NaOH} \times c_{NaOH}$
5. *We kennen alles behalve $c_{NaOH} \rightarrow$ deze kunnen we hieruit berekenen*

!! als je een polyprotisch zuur hebt dan heb je 2x (of 3x, ...) zoveel OH^- nodig om het equivalentiepunt te bereiken: bv. H_2SO_4 , H_2CO_3 , H_3PO_4

5.7 Reacties met gasontwikkeling

bv. $2 \text{HCl(aq)} + \text{Na}_2\text{S(aq)} \rightleftharpoons 2 \text{NaCl(aq)} + \text{H}_2\text{S(g)}$ (we duiden een gas aan door “g” of “↑”)

4 types reactie die aanleiding geven tot de productie van een gas:

Gas	Netto-ionenreactie
CO₂	$\text{CO}_3^{2-} + 2 \text{H}^+ \rightarrow \text{CO}_2 (\text{g}) + \text{H}_2\text{O}$ carbonaat + zuur $\text{Na}_2\text{CO}_3 (\text{aq}) + 2 \text{HCl} (\text{aq}) \rightarrow \text{CO}_2 \uparrow + 2 \text{NaCl} (\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}$
SO₂	$\text{SO}_3^{2-} + 2 \text{H}^+ \rightarrow \text{SO}_2 (\text{g}) + \text{H}_2\text{O}$ sulfiet + zuur $\text{K}_2\text{SO}_3 (\text{aq}) + 2 \text{HCl} (\text{aq}) \rightarrow \text{SO}_2 \uparrow + 2 \text{KCl} (\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}$
NH₃	$\text{NH}_4^+ + \text{OH}^- \rightarrow \text{NH}_3 (\text{g}) + \text{H}_2\text{O}$ ammoniumzout + sterke base $\text{NH}_4\text{Cl} (\text{aq}) + \text{NaOH} (\text{aq}) \rightarrow \text{NH}_3 \uparrow + \text{NaCl} (\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}$
H₂S	$\text{S}^{2-} + 2 \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2\text{S} (\text{g})$ sulfide + zuur $\text{NiS (v)} + 2 \text{HCl} (\text{aq}) \rightarrow \text{H}_2\text{S} \uparrow + \text{NiCl}_2 (\text{aq})$

Hoofdstuk 5: Reacties in oplossing

5.8 Redoxreacties

→ Reacties waarbij elektronen worden overgedragen tussen de reagentia

- oxidatie: verlies van elektronen
- reductie: opname van elektronen

bv. $2 \text{Mg} + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{MgO}$

- oxidatie: $\text{Mg} - 2\text{e}^- \rightarrow \text{Mg}^{2+}$ (Mg is reductans, want reduceert O₂)
- reductie: $\frac{1}{2} \text{O}_2 + 2\text{e}^- \rightarrow \text{O}^{2-}$ (O₂ is oxidans, want oxideert Mg)

! Bij een globale redox-reactie is het aantal elektronen dat wordt opgenomen in de reductie gelijk aan het aantal elektronen dat wordt afgegeven in de oxidatie

Er zijn ook redox-reacties waarbij de elektronen overdracht niet volledig is.

bv. $\text{H}_2 + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{HCl}$

- Cl heeft een grotere elektronegativiteit $\Rightarrow \text{Cl: } \delta^-$
- Cl heeft dus (gedeeltelijk) “extra elektronen” $\rightarrow$ is gereduceerd
- H heeft (gedeeltelijk) “minder elektronen” $\rightarrow$ is geoxideerd

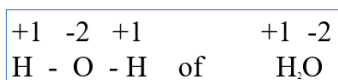
5.8.1 Identificatie van redoxreacties

→ nagaan of een oxidatiegetal vd atomen is veranderd
(oxidatiegetal = lading van het ion) ⇒ OEFENINGEN!!

def: **Oxidatiegetal** van een atoom in een molecule: de denkbeeldige lading die het atoom zou verkrijgen indien men de bindingselektronen tussen identieke atomen gelijk zou verdelen en in de andere gevallen de elektronen zou toekennen aan het atoom met de grootste elektronegativiteit.

- Elektronenpaar wordt aangetrokken door beide atomen
- Mate waarin elektronenpaar wordt aangetrokken door een atoom wordt bepaald door de elektronegativiteit: hoe groter EN, hoe sterker de aantrekking (waarden in PS)
- Binding tussen twee atomen: atoom met grootste EN "krijgt" een elektron en "wint" een lading -1, het andere een lading +1

bv. water



! Regels voor toewijzen oxidatiegetallen !

1. Element of enkelvoudige stof : oxidatiegetal 0 (bv. K, H₂, O₂, ...)
2. Monoatomisch ion: oxidatiegetal = lading (bv. K⁺, Cl⁻, ...)
3. Zuurstof O : altijd oxidatiegetal -2
 - o uitz. peroxiden: -1 (stoffen waarbij 2 zuurstoffen covalent gebonden zijn bv. H₂O₂)
4. Waterstof H: altijd oxidatiegetal +1
 - o uitz. covalente binding met metaal (-1)
5. Binaire covalente bindingen: 2 soorten atomen met een covalente binding ertussen (bv. NF₃)
 - o Welk heeft grootste EN? (F)
 - o Kijk naar ionaire verbinding waar deze het anion is? (KF)
 - o Kijk naar de lading van het anion (-1)
 - o Lading van het anion hebben we
 - o Deze lading invullen om deze van het ander atoom te berekenen (lading N = +3)
6. Neutrale verbinding : som van de oxidatiegetallen is nul
Polyatomisch ion : som van de oxidatiegetallen is gelijk aan de lading

5.8.2 Balanceren van redoxreacties !!p 23-25

1. oxidatiegetallen bepalen
2. oxidatie en reductie bepalen (apart opschrijven + balanceren)
 - reductie: afname oxidatiegetal
 - oxidatie: toename oxidatiegetal
3. beide reacties ook gebalanceerd in O en H?
 - in orde? Doe niets, ga naar stap 5
 - in zuur milieu:
 - o waar O tekort voeg H_2O toe
 - o waar H tekort voeg H^+ toe
 - in basisch milieu
 - o waar O tekort voeg H_2O toe
 - o waar H tekort H_2O toe en aan de andere kant OH^-
 - o schrap H_2O moleculen die aan beide kanten voorkomen
4. balanceer beide reacties zowel in O en H als in de OG van de atomen
5. vermenigvuldig de reacties zodat in de beide reacties het aantal uitgewisselde elektronen gelijk is
6. tel beide reacties op

H6: THERMOCHEMIE

6.1 Basisbegrippen

6.1.1 Energie

→ We kunnen enkel omzettingen van energie meten, maar de energie zelf kunnen we niet vastnemen

- fysisch proces (bv. water koken, door toevoegen van warmte)
- chemisch proces (bv. verbranding van propaan)
 - o !!! verbranding betekent toevoegen van O_2

def: Thermochemie: tak van chemie waarin energieveranderingen tijdens chemische reacties worden bestudeerd (onderdeel van thermodynamica)

- **energie** = vermogen om arbeid te verrichten/warmte te produceren
 - o een systeem bezit energie
- **arbeid w** = vorm van energieoverdracht, waarbij men een geheel van deeltjes een gerichte verplaatsing laat ondergaan
 - o elektrische arbeid: elektronen bewegen alle in 1 richting (stroom)
 - o druk-volume arbeid: men laat het volume van een systeem toenemen, hierdoor kan men bv. een voorwerp verplaatsen
- **warmte q** = vorm van energieoverdracht die alleen effect heeft op de thermische beweging van deeltjes, die volkomen willekeurig is

- **potentiële energie E_{pot} :**
 - o plaats van de deeltjes tov elkaar
 - o samenstelling van de materie
 - o chemische energie: zit in de bindingen tussen deeltjes
 - kan vrijkomen tijdens chemische reactie
- **kinetische energie E_{kin}**
 - o heeft te maken met massa en snelheid ($E_{\text{kin}} = 1/2 mv^2$)
 - o translatie, vibratie en rotatie is ook een vorm van bewegen
 - o zorgt voor de thermische energie van een systeem (deze wordt overgedragen in de vorm van warmte)

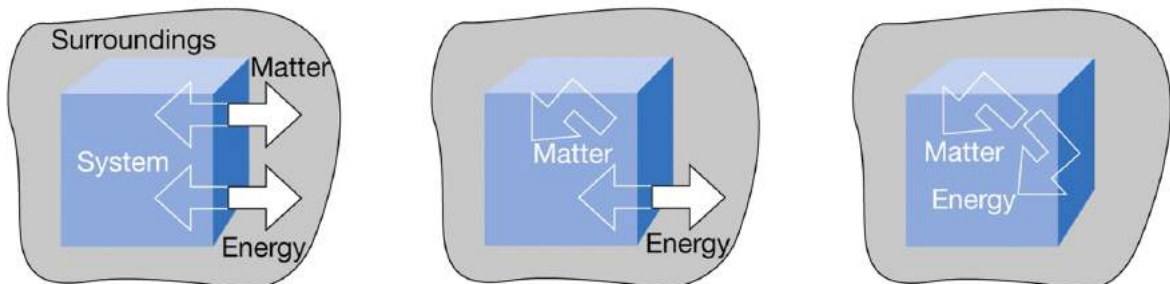
⇒ **inwendige energie $U = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}}$**

eenheid van energie:

- Joule (J)
- 1 kWh = 360.000 J
- 1 calorie = 4,184 J (= de hoeveelheid energie nodig om 1g water 1°C of 1K te doen stijgen)

6.1.2. Systeem en omgeving

- systeem: wat we bestuderen
- omgeving: rest
- gescheiden door grenzen (reële of denkbeeldige grenzen)



open systeem uitwisseling van massa en energie <i>bv. bord soep</i>	gesloten systeem uitwisseling van energie, maar geen massa <i>bv. pot soep (we kunnen deze opwarmen)</i>	geïsoleerd systeem geen uitwisseling <i>bv. thermosfles</i>
--	---	--

6.2 Temperatuur

→ beweging van deeltjes levert een bepaalde E_{kin} , temperatuur is een maat voor intensiteit van deze bewegingen.

- weinig bewegingen → lage E_{kin} → lage temperatuur

Temperatuurschalen:

- Celsius (°C): gebaseerd op bevriezen en koken van water
- Kelvin (K): absolute schaal, materie zonder E_{kin} heeft $T = 0 \text{ K}$

Omrekening Celsius (t) naar Kelvin (T) en omgekeerd: $T (\text{K}) = t (^\circ\text{C}) + 273,15$

!! Warmte $\neq$ temperatuur

- warmte: energie
- temperatuur: maat voor hoeveelheid kinetische energie

6.3 Eerste hoofdwet van de thermodynamica

Systeem kan energie uitwisselen en er kunnen processen plaatsgrijpen

MAAR: **totale energie van systeem + omgeving blijft constant!**

→ energie verdwijnt niet, maar kan wel in een andere vorm worden omgezet.

Energie stroomt altijd van een plaats met hogere naar een plaats met lagere energie



- endotherm: warmte opgenomen
- exotherm: warmte afgegeven

Inwendige energie U van het systeem verandert met een bedrag gelijk aan de som van de geleverde arbeid en de toegevoerde warmte: $\Delta U = q + w$

- Leveren arbeid w op systeem
- Toevoeren energie q onder vorm van warmte

6.4 Warmtecapaciteit

→ eenheden enz nog uit cursus halen!!

Er is een verschillende hoeveelheid warmte nodig om verschillende stoffen met 1 graad te verhogen: $q = C \Delta T$

- Grote C = veel warmte nodig om temperatuur te verhogen
- Kleine C = weinig warmte nodig om temperatuur te verhogen
- C = extensieve grootheid

2 liter water opwarmen vereist meer warmte dan 1 liter water opwarmen

→ **specifieke warmtecapaciteit** C_s : hoeveelheid warmte nodig om 1 g stof 1 K in temperatuur te doen stijgen.

○ voor water: $4,18 \frac{J}{K \cdot g}$

→ **Molaire warmtecapaciteit** C_m : hoeveelheid warmte nodig om 1 mol stof 1 K in temperatuur te doen stijgen.

6.5 Energieverandering bij fysische omzettingen

Fysische omzettingen gaan gepaard met energieoverdracht

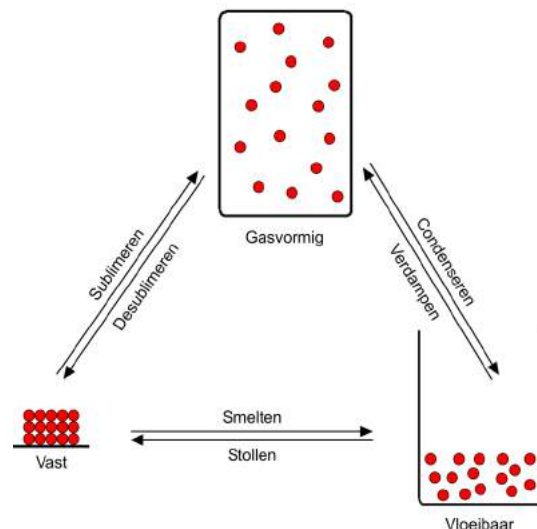
- **Molaire smeltenthalpie**: hoeveelheid warmte nodig om 1 mol van de stof te smelten bij het smeltpunt (P=cte)
- **Molaire verdampingsenthalpie**: hoeveelheid warmte nodig om 1 mol van de stof te verdampen bij het kookpunt (P=cte)
- **Molaire sublimatie-enthalpie**: hoeveelheid warmte nodig om 1 mol van de stof te sublimeren bij het sublimatiepunt (P=cte)

Faseovergangen:

Smelten → deeltjes komen los uit rooster

⇒ de intermoleculaire krachten moeten overwonnen worden

- hoe sterker deze krachten, hoe harder de deeltjes moeten trillen voor ze uit hun rooster gaan
- hoe hoger het smeltpunt (en kookpunt)
- hoe hoger de smeltenthalpie



6.6 Toestandsfunctie

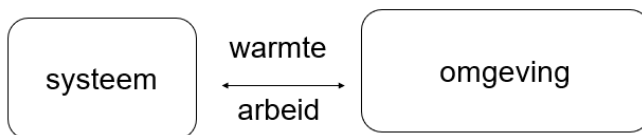
Energie is een toestandsfunctie: de energie die een systeem onder bepaalde omstandigheden bezit hangt niet af van de manier waarop het systeem in die welbepaalde toestand is gekomen, maar van de toestand zelf.

- Extensief: afhankelijk van de hoeveelheid materiaal (bv. U , V)
- Intensief: onafhankelijk van de hoeveelheid materiaal (bv. T , P)
- Geen toestandsfunctie: arbeid en warmte

Bij proces: verschil in toestandsfunctie = eind - begin

6.7 Energieveranderingen bij chemische reacties

Reactie in een systeem is een uitwisseling van energie met de omgeving (arbeid en/of warmte)



q (warmte)	+ : systeem wint thermische energie	- : systeem verliest thermische energie
w (arbeid)	+ : arbeid wordt geleverd op het systeem	- : systeem levert arbeid aan de omgeving
ΔU (verandering inwendige energie van het systeem)	+ : energie wordt opgenomen door het systeem	- : energie wordt afgegeven door het systeem

Eerste hoofdwet: $\Delta U = q + w$

- **Warmte**: wordt bepaald door meten van temperatuursveranderingen (zie calorimetrie)
- **Arbeid**
 - o kan voorkomen onder verschillende vormen
 - o afhankelijk van in welke omstandigheden waarbij de reactie doorgaat, zal de arbeid anders
 - o bij veel chemische reacties is deze arbeid zogenaamde PV arbeid, geassocieerd met een volumeverandering van het systeem.
 - $w = -\Delta(PV) = -P \Delta V$ (bij constante druk)

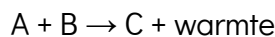
6.7.2 Enthalpie

1. $\Delta U = q + w$
2. We gaan uit van constante druk: $\Delta U = q_p + w$
3. $w = -P\Delta V$
4. Enthalpie $H = U + PV \Rightarrow \Delta H = \Delta U + P\Delta V$
 $\Rightarrow \Delta H = q - P\Delta V + P\Delta V = q_p$

Wanneer een proces doorgaat bij constante druk dan is de hoeveelheid warmte die wordt uitgewisseld met de omgeving gelijk aan de enthalpieverandering van het systeem

$$\Delta V \text{ klein} \Rightarrow \Delta U \approx \Delta H$$

6.7.3 Enthalpieveranderingen bij chemische reacties



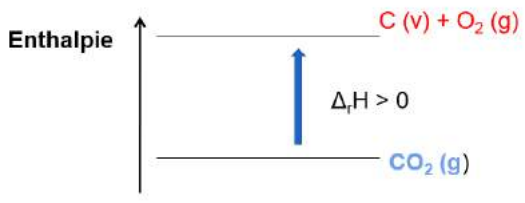
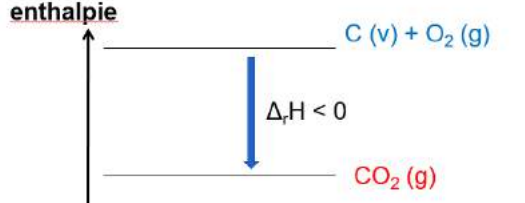
Wanneer we een reactie hebben dat doorgaat bij constante druk, dan zal er warmte uitgewisseld worden met de omgeving. De hoeveelheid warmte dat wordt uitgewisseld noemt men de reactie-enthalpie. ($\Delta_r H$)

- exothermische reactie: negatief
- endothermische reactie: positief

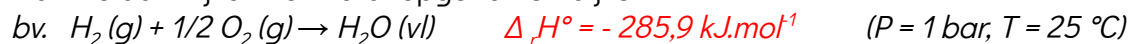
$$\begin{aligned}\Delta_r H &= H_{\text{eind}} - H_{\text{begin}} \\ &= H_{\text{reactieproducten}} - H_{\text{reagentia}}\end{aligned}$$

Het probleem: je kan niet de enthalpie-inhoud van een systeem meten, je kan deze wel berekenen. ; MAAR: we kunnen wel de verandering meten

$\Rightarrow$ reactie bij constante druk $\rightarrow$ de verandering is de warmte die wordt uitgewisseld

$H_{\text{producten}} > H_{\text{reagentia}}: \Delta H > 0$ $q_p > 0$ Endotherme reactie	$H_{\text{producten}} < H_{\text{reagentia}}: \Delta H < 0$ $q_p < 0$ Exotherme reactie
Endotherme reactie $\text{CO}_2 \rightarrow \text{C} + \text{O}_2$  $\Delta_r H = H(\text{producten}) - H(\text{reagentia})$ $\Delta_r H = [H(\text{C(v)}) + H(\text{O}_2(\text{g}))] - H(\text{CO}_2(\text{g}))$	Exotherme reactie $\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$  $\Delta_r H = H(\text{producten}) - H(\text{reagentia})$ $\Delta_r H = H(\text{CO}_2(\text{g})) - [H(\text{C(v)}) + H(\text{O}_2(\text{g}))]$

Thermochemische reactievergelijking: als ze na de reactievergelijking de hoeveelheid warmte dat vrijkomt of wordt opgenomen bijzet:



Reactie-enthalpieën worden meestal weergegeven bij $P = 1 \text{ bar}$ en $T = 298 \text{ K}$. Dit wordt aangeduid door: $\Delta_r H^\circ$

6.8 Calorimeter

!! oefening op het examen: let op de tekens

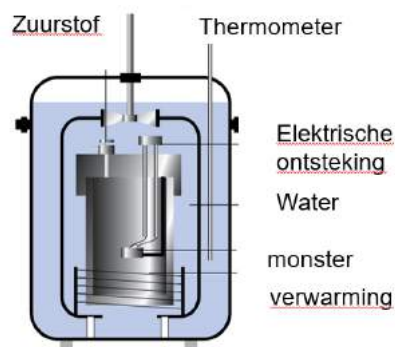
Calorimetrie: bepalen de hoeveelheid warmte die opgenomen wordt of vrijkomt tijdens een chemische reactie

→ kan of bij constant volume, of bij constante druk

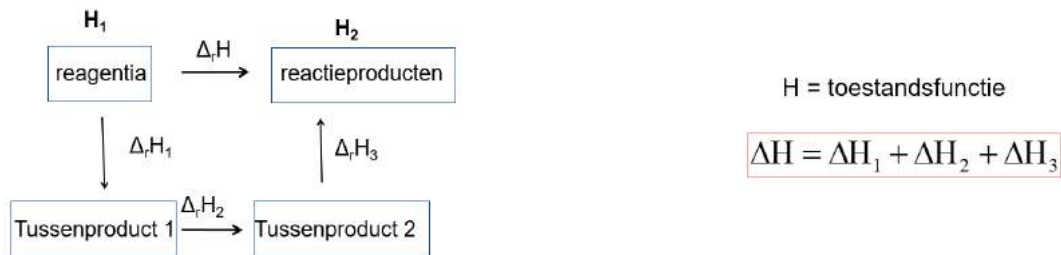
Bij constante volume gebeurt dit via een bomcalorimeter

- verbrandingsreacties
- constant volume $\Rightarrow q = \Delta U$ (want $\Delta V = 0$)

$$q_V = \Delta U = mC_s \Delta T$$



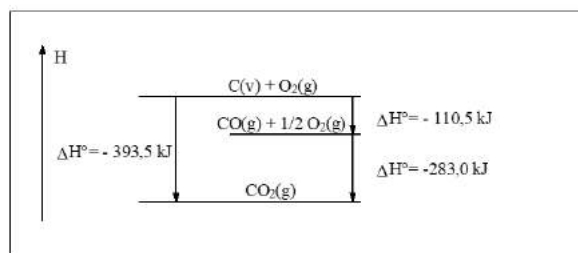
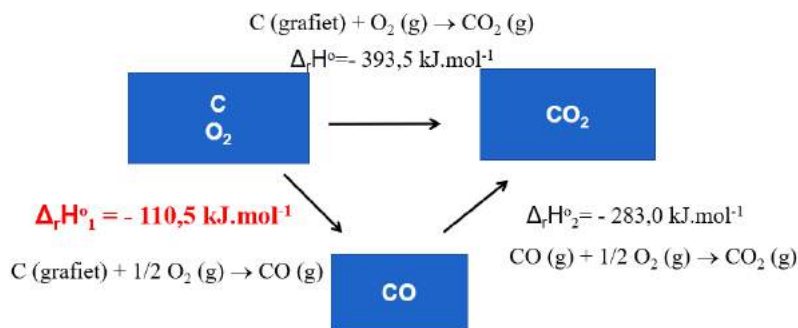
6.9 Wet van Hess



Als we bv in een calorimeter C met een overmaat aan O_2 willen laten reageren om de $\Delta_r H$ te berekenen van de reactie $C + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO$.
 MAAR door de overmaat aan O_2 gaat deze CO meteen omgezet worden naar CO_2 , dus hoe kunnen we deze dan berekenen?

⇒ Wet van Hess

- We kennen de $\Delta_r H^\circ$ van $C + O_2 \rightarrow CO_2$
 - We kennen de $\Delta_r H^\circ$ van $CO \rightarrow CO_2$
- ⇒ hieruit kunnen we de $\Delta_r H^\circ$ van $C + O_2 \rightarrow CO$ halen



6.10 Standaardvormingsenthalpie $\Delta_f H^\circ$

→ elk proces gaat gepaard met een enthalpieverandering en dan is de standaard vormingsenthalpie = de verandering van de enthalpie wanneer 1 mol van een stof wordt gevormd vertrekkend van de enkelvoudige stabiele stoffen in de standaardtoestand.

- **Enkelvoudig:** bestaat uit één atoomsoort: H_2 , O_2 , C, Na,...
- **Stabiel:** meest stabiele vorm bij 1 bar (en $25^\circ C$): C (grafiet) i.p.v. C (diamant)
- **Eenheid:** $J \cdot mol^{-1}$
- Waarde afhankelijk van aggregatietoestand g gevormde stof
- Enkelvoudige stabiele stoffen: $\Delta_f H^\circ = 0$

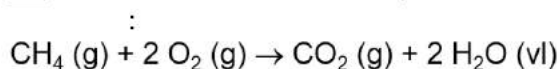
→ Je vindt deze waarden in je tabellenboekje, er staat in deze tabel enkel de gevormde stoffen, maar je weet dus dat deze komt van een reactie.

→ Meestal negatief, er komt warmte vrij bij een binding (verliest energie). Dit is positief want alle systemen streven naar een zo laag mogelijk energie-niveau

We gebruiken deze om reactie-enthalpieën te berekenen:

$$\Delta_r H^\circ = \sum_p n_p \Delta_f H_f^\circ - \sum_r n_r \Delta_f H_r^\circ$$

Vb: bereken de reactie-enthalpie voor



$\Delta_f H^\circ$ (kJ/mol): $CH_4(g)$: -74,8
 $CO_2(g)$: -393,5
 $H_2O(l)$: -285,8
 $O_2(g)$: 0

$$\begin{aligned} \Delta_r H^\circ &= \sum_p n_p \Delta_f H_p^\circ - \sum_r n_r \Delta_f H_r^\circ = \Delta_f H_{CO_2(g)}^\circ + 2\Delta_f H_{H_2O(l)}^\circ - \Delta_f H_{CH_4(g)}^\circ - 2\Delta_f H_{O_2(g)}^\circ \\ &= -890 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \end{aligned}$$

→ sowieso oefening op het examen

- ! eind - beginproducten
- ! let op de tekens

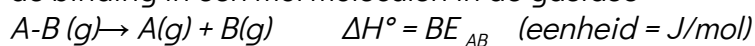
6.11 Bindingsdissociatie-enthalpie

Berekening van reactie-enthalpie kan ook op basis van de bindingsenergie in de reactiepartners

Reactie-enthalpie = energie nodig om bindingen te breken in de reagentia – energie die vrijkomt bij vorming van de bindingen in de reactieproducten

$$\Delta_r H^\circ = \sum BE_{\text{gebroken bindingen}} - \sum BE_{\text{gevormde bindingen}}$$

- Bindingsenergie BE: standaard enthalpieverandering bij homolytisch breken van de binding in één mol moleculen in de gasfase



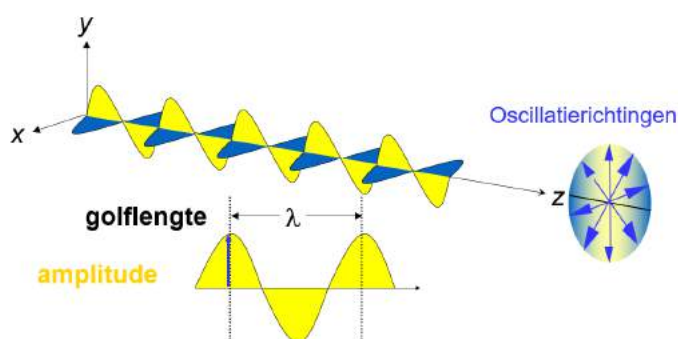
- Wanneer de binding gevormd wordt uitgaande van de atomen komt een bedrag aan energie vrij dat in absolute waarde gelijk is aan de bindingsenergie maar tegengesteld van teken.



H7: ATOOMSTRUCTUUR 1

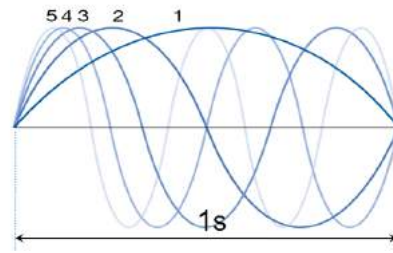
7.1 Elektromagnetische straling

Elektromagnetische straling: elektrische en magnetische velden oscillerend loodrecht op bewegingsrichting → kinetische energie verplaatst zich als een golf



frequentie f: het aantal golven dat per tijdseenheid een bepaald punt passeert.

→ eenheid: $s^{-1} = \text{Hz}$ (Hertz)

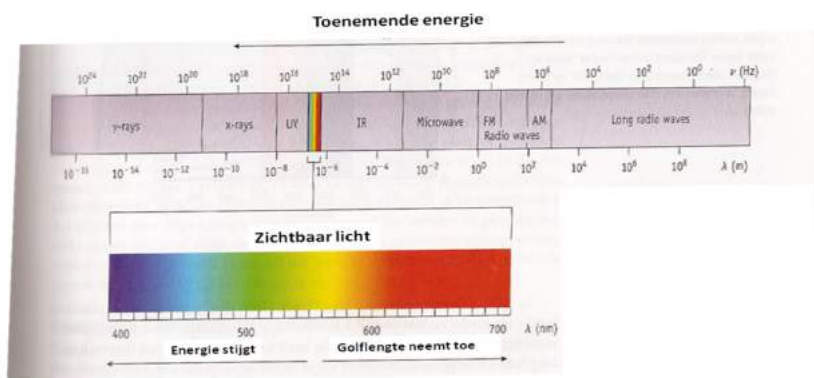


Nr.	ν / Hz
1	0,5
2	1
3	1,5
4	2
5	2,5

In vacuüm bewegen alle soorten straling met dezelfde snelheid

$c = 2,99792 \times 10^8 \text{ m/s}$ (lichtsnelheid) $c = \lambda \times f$

→ c altijd hetzelfde, dus voor golven met een grote golflengte zal het dus een kleine frequentie hebben en omgekeerd



Wat hiervan te kennen:

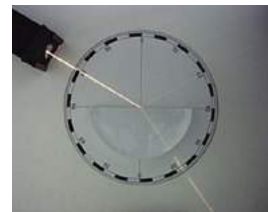
- Zichtbaar licht: 400nm-700nm
 - o 400 nm: blauw
 - o 700 nm: rood
- volgorde:
 1. γ -straling (gamma-straling)
 2. X-straling
 3. ultraviolet
 4. zichtbaar licht
 5. infrarood
 6. microgolven
 7. FM
 8. AM

7.1.1 Golfkarakter van licht

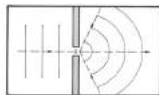
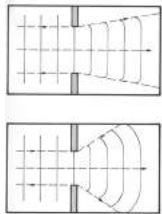
- Monochromatisch licht: één enkele golflengte
- Polychromatisch licht: meerdere golflengten

Refractie: breking van licht

- Als men licht op een materiaal afstuurt dat een andere dichtheid dan lucht heeft dan zal het licht een hoek maken



Dispersie



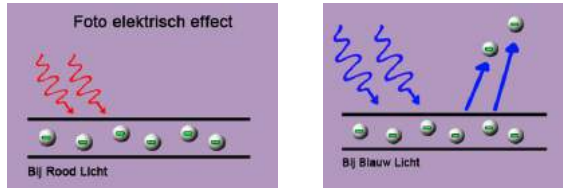
7.1.2 Deeltjeskarakter van het licht

Max Planck (1858-1947): elektromagnetische straling is gekwantiseerd :

- Energie kan slechts worden opgenomen of afgegeven in discrete hoeveelheden “pakketjes energie” .
- Deze pakketjes bevatten een welbepaald aantal zogenaamde kwanta
→ kwantum = kleinste eenheid van energie die onder de vorm van elektromagnetische straling kan worden opgenomen (afgegeven))
- De energie van kwantum $E = hf$
 - h = Constante van Planck= $6,626 \times 10^{-34}$ J.s
 - f = frequentie
- De hoeveelheid energie die materie opneemt of afgeeft bij interactie met elektromagnetische straling (ΔE) wordt dus gegeven door: $\Delta E = n.(hf)$
 - n is een geheel getal → aantal keer het pakketje

Einstein: foto-elektrisch effect:

- Als je materie hebt en je stuurt hier licht met een bepaalde frequentie op af, dan worden er elektronen uit de materie weggeschoten
- Fotonen kunnen slechts worden opgenomen (elektronen komen slechts vrij) wanneer de energie ervan voldoende groot is = drempelwaarde!!
- Intensiteit speelt hierbij geen rol.



- Elektromagnetische straling bestaat uit een stroom van deeltjes, fotonen genoemd.
- Deze deeltjes bezitten energie
- De energie van één foton bedraagt $E_{\text{foton}} = hf = hc/\lambda$

7.2 Atoommodel van Bohr

Lijnspectrum van H werd onderzocht

- Balmer stelde vast dat de frequenties die men vastgesteld had in het zichtbaar gebied, dat dit een bepaald patroon vormde

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad - \quad R_H = \text{Rydberg constante} = 1,0974 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

Verklaring regelmaat ?

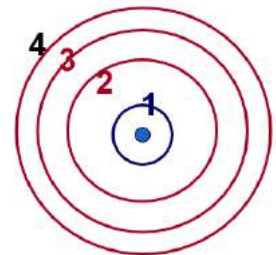
→ Bohr : lijnen die men vastgesteld had afkomstig van energie-overgangen tussen

- toestand gekenmerkt door kwantumgetal 2
- en toestanden gekenmerkt door kwantumgetal n

1. Elektron beweegt in een cirkelvormige baan, gekenmerkt door kwantumgetal $n = 1, 2, 3, \dots$ de straal van elke baan wordt gegeven door

$$r = n^2 (4\pi\epsilon_0) \frac{h^2}{4\pi^2 m Z e^2} = \text{cte} \times \frac{n^2}{Z}$$

Z = het atoomnummer van de kern



2. In elke stationaire toestand is de energie van elektron constant en gegeven door:

$$E = -\frac{1}{n^2} \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{2\pi^2 m Z^2 e^4}{h^2} = -\text{cte} \times \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{R_H hc}{n^2} \quad R_H = 2,179 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

! Energie is negatief → aantrekkende energie. Als er elektron dicht bij de kern is, zal de aantrekkingskracht groter zijn ⇒ energie lager

3. Energie van elektron in H is gekwantiseerd tot welbepaalde toestanden :

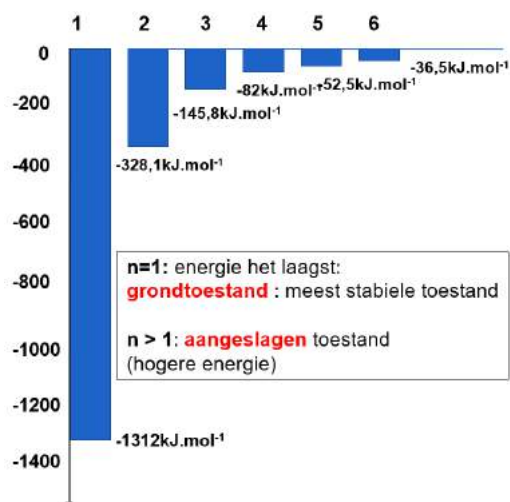
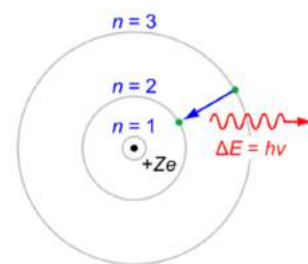
$$E_1 < E_2 < E_3 < E_4 < \dots$$

- **Grondtoestand** (energie het laagst)
- **Geëxciteerde toestanden** (heeft energie opgenomen)

Stationaire toestanden: in toestand blijft energie constant

4. Bij overgang van de ene naar de andere toestand wordt energie opgenomen / uitgezonden (als elektromagnetische straling) waarbij:

$$E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$



→ energie van 1 mol elektronen die zich op schil n zou bevinden

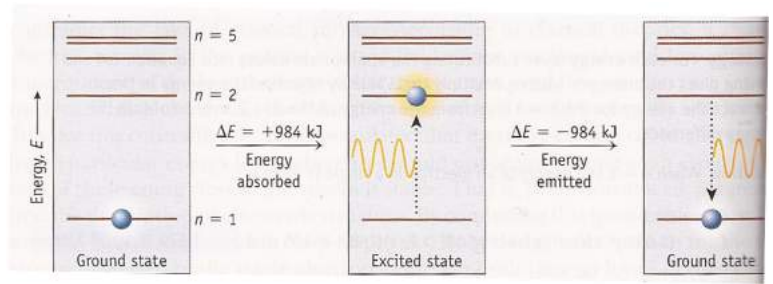
7.2.2 Verklaring van de atoomspectra

1 → 2 (excitatie)

- hogere schil
- hogere energie
- energie opgenomen

2 → 3 (terugvallen)

- naar lagere schil (grondtoestand)
- lagere energie
- energie afgegeven



$$\Delta E = E_{\text{eind}} - E_{\text{begin}} = \left(-\frac{R_H hc}{2^2} \right) - \left(-\frac{R_H hc}{1^2} \right) = 0,75 R_H hc = 1,63 \cdot 10^{-18} \text{ J.atoom}^{-1}$$

$$E = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}^{-1} \times 2,998 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}}{1,63 \cdot 10^{-18} \text{ J}} = 1,217 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 121,7 \text{ nm}$$

7.3 Golf-deeltje dualiteit van materie en energie

Einstein: fotonen zijn individuele pakketjes van energie met eigenschappen van deeltjes (foto-elektrisch effect)



Licht heeft een golfkarakter: diffractie, interferentie,...

licht is een deeltje



licht is een golf

Einstein: licht bestaat uit fotonen. Deze fotonen hebben een welbepaalde massa. Het verband tussen de energie van de fotonen en hun massa wordt gegeven door:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = mc^2 \quad \text{met massa foton:} \quad m = \frac{E}{c^2} = \frac{hf}{c^2} = \frac{h}{\lambda c}$$

Na verloop van tijd komt men overeen dat afhankelijk van de omstandigheden kan licht als een deeltje of als een golf worden beschouwd.

7.3.1. De Broglie-golflengte voor deeltjes

"Net zoals licht vertoont elke materie in beweging naast een deeltjesaspect ook een golfaspect".

De Broglie : voor elk deeltje in beweging, dus ook voor elektron met massa m en snelheid v , geldt een betrekking die een verband legt tussen massa, snelheid en golflengte (of frequentie) van deze beweging:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad m = \frac{E}{c^2} = \frac{hf}{c^2} = \frac{h}{\lambda c}$$

- h is zéér klein
- mv moet dus ook zeer klein zijn om een meetbare golflengte te verkrijgen (bv. auto kunnen we de golflengte berekenen, maar totaal niet meten. Dus moeten we hier niet over nadenken dat deze zich voortbeweegt als golf)

7.3.2 onzekerheidsprincipe van heisenberg

Dualiteit golf-materie:

- Straling heeft eigenschappen van deeltjes
- Kleine deeltjes zoals elektronen vertonen eigenschappen van een golf

⇒ Onzekerheidsprincipe van Heisenberg:

Gooide atoommodel van Bohr omver;

- Bohr: men kan energie én plaats van een elektron berekenen
- Heisenberg : er is een beperking op de nauwkeurigheid waarmee terzelfdertijd én de plaats (x) én de hoeveelheid van beweging (mv) kan bepaald worden.

m.a.w.: het is onmogelijk voor een klein deeltje als een elektron terzelfdertijd exact de energie én de plaats te weten. Hoe nauwkeuriger men het ene kent, hoe minder nauwkeurig men het andere kent.

$$\Delta(mv) \times \Delta(x) \geq \frac{h}{4\pi}$$

- de onzekerheid van mv
- de onzekerheid van de plaats

Besluit

1. De golflengte geassocieerd met beweging van het subatomaire elektron ligt in het X-straal gebied van het elektromagnetisch spectrum.
2. De golflengte geassocieerd met beweging van een lichaam uit de macrowereld (masse in de orde van de kg) is zo kort dat ze niet kan waargenomen worden en dus niet relevant is

⇒ Voorwerpen met grote massa: deeltje

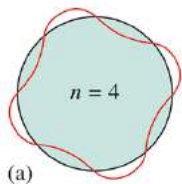
Voorwerpen met kleine massa (elektronen,): zowel deeltjes- als golfkarakter.

- Bij macrosystemen : voor bewegend lichaam kan terzelfdertijd én de snelheid én de plaats met grote nauwkeurigheid bepaald.
- Bij microsystemen : is voorgaande onmogelijk: hoe precieser het moment (m.v) hoe onnauwkeuriger de plaatsbepaling (x) (en omgekeerd)

⇒ Golf-deeltje dualiteit zorgt voor nieuw model: golfmechanisch atoommodel

7.4 Golfmechanisch atoommodel

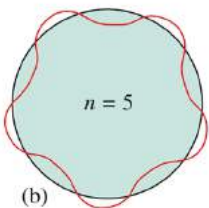
→ Dit model moest gemaakt worden omdat we sommige dingen niet konden uitleggen ad hand van het model Bohr



(a)

“Waarom zijn slechts bepaalde banen mogelijk in het Bohr-model voor het H-atoom?”

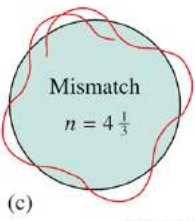
→ Het elektron gedraagt zich als een staande elektromagnetische golf
= een golf die niet beweegt in de ruimte.
= stabiele toestand v.h. elektron in een atoom



(b)

→ Slechts sommige frequenties van de elektrongolfbeweging kunnen bestaan. Het elektron kan slechts welbepaalde energieën bezitten maw. de trillingen zijn gekwantiseerd

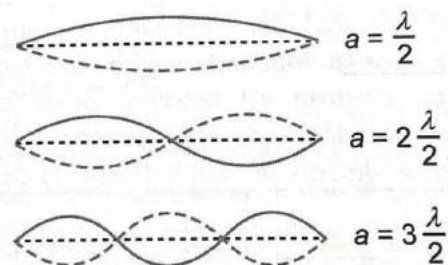
Bij staande golven blijven de nodale punten (punten met amplitude 0) op dezelfde plaats



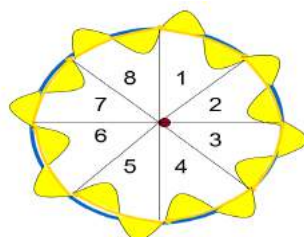
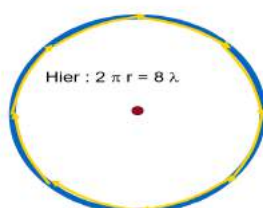
(c)

Stel elektron beweegt in een cirkelvormige baan rond kern

- Slechts welbepaalde banen zijn mogelijk voor het e^-
- omtrek vd baan = geheel # keren de golflengte v.h. e^- als staande golf
- Golfmechanica : beweging kan beschreven als een golf
- Staande golf als : $2\pi r = n\lambda \rightarrow$ stabiele toestand v.h. e^- in atoom



Figuur 7.17 – Mogelijke staande golven bij trillingen van een snaar tussen 2 vaste punten. De afstand a tussen de vaste uiteinden is steeds gelijk aan een geheel aantal keren de halve golflengte van de staande golf.



Links: Klassieke beschrijving van beweging
Rechts: Voorstelling beweging via golfkarakter

7.4.1 Golfvergelijkingen

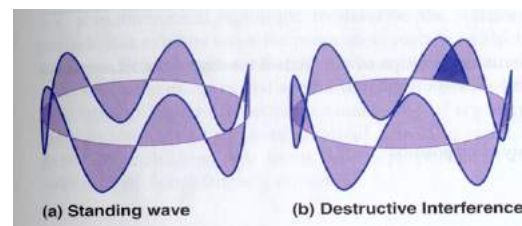
Indien $2\pi r \neq n\lambda$ gaat de golf uiteindelijk zichzelf vernietigen.

⇒ Toegelaten vibraties: $2\pi r = n\lambda$

- r = de straal van de cirkel.

Toegepast op **H-atoom**:

- Elektron gedraagt zich als cirkelvormige staande golf
- Alleen de waarden voor r zijn mogelijk waarbij de golflengte een bepaald aantal keer de omtrek van de cirkel is.
- Laagste energie: omtrek = golflengte, geen nodale punten
- Hogere energie: toenemend aantal knooppunten



1926: Oostenrijker **Schrödinger** stelt wiskundige theorie, de golfmechanica, op.

- Elektron wordt beschreven als een staande golf
- Ontwikkeling van de theorie van de kwantummechanica, die vandaag gebruikt wordt om energie en ruimtelijke verdeling van elektronen in atomen en moleculen te beschrijven.
- Golfvergelijking of Schrödingervgl: differentiaalvgl voor de energie van elektron in het H-atoom
- Levert bij oplossing een aantal wiskundige functies; golf functies
- Slechts enkel golf functies zijn toegelaten, elk geassocieerd met een toegelaten energie, maw. de energie van elektron is gekwantiseerd.

Algemene vorm **Schrödingervergelijking**: $\hat{H}\Psi = E\Psi$

- Ψ = golf functie : functie van de coördinaten (x,y,z) van het bewegend deeltje (bv. het elektron)
- E = totale energie = Potentiële energie + kinetische energie
(attractie kern-elektron) (beweging elektron)
- $\hat{H}$ = operator (bewerking : levert andere functie op)

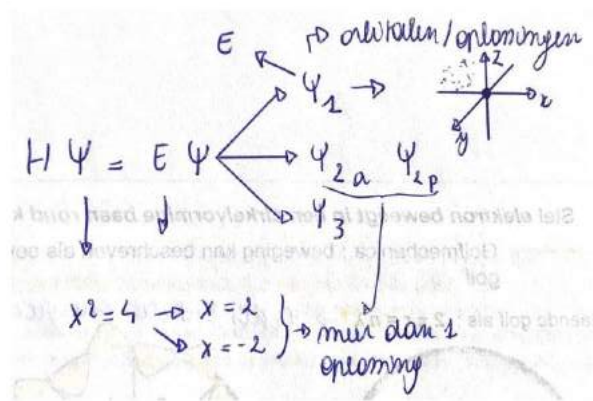
Wat levert oplossen van de Schrödingervergelijking?

1. een aantal wiskundige uitdrukkingen voor Ψ (Ψ = golf functie = orbitaal)
2. én corresponderende energiewaarden E

Golf functie Ψ : wiskundige betrekking die de amplitude van de golf van een elektron weergeeft op een bepaalde plaats van het elektron in de ruimte rond de kern (gegeven door x,y,z coördinaten). Bij elke golf functie hoort een bepaalde energie. Slechts enkele energiewaarden zijn toegelaten (E = gekwantiseerd)

Elke golf functie wordt gekarakteriseerd door drie kwantumgetallen:

1. n
2. l
3. m_l



Kwadraat van de golffunctie in een punt Ψ^2 :

= KANS om het elektron met een gegeven energie te vinden op een plaats rond de kern
 = waarschijnlijkheidsdichtheid(funcitie) op deze plaats

Waarschijnlijkheid om een elektron te vinden in een volume-element dV kan berekend worden als het product vd waarschijnlijkheidsdichtheid en dV

Interpretatie van Born voor de golffunctie:

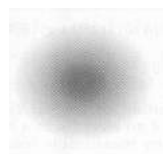
Voor een gegeven volume, is de kans om er een elektron te vinden groter naarmate Ψ^2 Toeneemt.

Dichtheids/ densiteitsplots: om de waarschijnlijkheid weer te geven om op een bepaalde plaats tov de kern een elektron met een bepaalde energie te vinden

- Toegepast op het waterstof (H)-atoom: $E = -cte \times \frac{Z^2}{n^2}$
- **Toegelaten energie van het elektron:** zie Bohr
 - **Plaats:** onzekerheidsprincipe: er is een bepaalde kans om een elektron te vinden op een welbepaalde plaats op een welbepaald ogenblik.

Het kwadraat van de golffunctie Ψ^2 in een gegeven punt is evenredig met de waarschijnlijkheid om het elektron in dat punt te vinden. Deze kans wordt weergegeven in zgn. densiteitsplots

Densiteitsplot voor het H-atoom
 in de grondtoestand ($n = 1$)



7.4.2 Orbitalen en kwantumgetallen

Het oplossen vd Schrödingervergelijking voor het H-atoom levert een set golffuncties Ψ met corresponderende energieën.

→ Deze golffuncties worden **orbitalen** genoemd

Volgens de ideeën van Born en Heisenberg kennen we de energie vh elektron in een orbitaal, maar voor de plaats enkel de kans (via Ψ^2) om het elektron te vinden in een bep gebied rond de kern.

Een elektron met een bep golffunctie bezet een welgedefinieerd orbitaal met een gegeven energie, waarbij het orbitaal wordt beschreven door 3 kwantumgetallen n, l, m_l :

Ψ_{n, l, m_l}

7.4.2.1 Het hoofdkwantumgetal n

- positief, geheel getal : 1,2,3,4,...
- bepaald de *energie* vh elektron
- bepaald de *afmetingen* vh atoom

$$E = -\text{cte} \times \frac{Z^2}{n^2}$$

$n \nearrow$: **afmetingen** nemen toe (elektron verder van kern)
energie neemt af (wordt minder negatief)

Voor sommige waarden van n zijn er meerdere orbitalen

Een **elektronenschil of hoofdniveau** : K, L, M, N, ...
= groep orbitalen met dezelfde n

Waarde van n	Voorstelling
1	K
2	L
3	M
4	N

7.4.2.2 Het nevenkwantumgetal l

- gehele waarden: $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ voor elke waarde van n
- bepaalt de vorm orbitaal
 - $l = 0$: s-orbitaal
 - $l = 1$: p-orbitaal
 - $l = 2$: d-orbitaal
 - $l = 3$: f-orbitaal

Binnen een hoofdschil met hoofdkwantumgetal n kunnen er verschillende orbitalen zijn met eenzelfde waarde van l

Deze orbitalen met dezelfde l vormen een **subschil** of **subniveau**

Waarde van l	Voorstelling
0	s
1	p
2	d
3	f

7.4.2.3 Het magnetisch kwantumgetal m_l

- Binnen een subschil zijn, voor elke waarde van l , verschillende orbitalen mogelijk.
- Magnetisch kwantumgetal $m_l = -l, -l+1, -l+2, \dots, 0, \dots, l-1, l$
- Bepaalt oriëntatie in de ruimte
 - orbitalen in een gegeven subschil verschillen in ruimtelijke oriëntatie, maar niet in energie
- Per subniveau (waarde van l) zijn er $2l + 1$ orbitalen.
- Het aantal m_l waarden geeft het **aantal orbitalen** in een gegeven subschil

7.4.2.4 Schillen en subschillen

De toegelaten combinaties vd 3 kwantumgetallen worden in de tabel hieronder weergegeven. De analyse vd tabel toont aan:

- $n = \#$ subniveaus in een schil
- $2l + 1 = \#$ orbitalen in een subschil
- $n^2 = \#$ orbitalen in een schil

Hoofdkwantumgetal		Nevenkwantumgetal		Magnetisch kwantumgetal m_ℓ	Aantal en type orbitalen in de subschil	Totaal aantal orbitalen in de schil = n^2
Hoofd-niveau		Subniveau				
n	Schil	ℓ	Notatie			
1	K	0	1s	0	één 1s-orbitaal	1
2	L	0	2s	0	één 2s-orbitaal	4
		1	2p	+1, 0, -1	drie 2p-orbitalen	
3	M	0	3s	0	één 3s-orbitaal	9
		1	3p	+1, 0, -1	drie 3p-orbitalen	
		2	3d	$\pm 2, \pm 1, 0$	vijf 3d-orbitalen	
4	N	0	4s	0	één 4s-orbitaal	16
		1	4p	+1, 0, -1	drie 4p-orbitalen	
		2	4d	$\pm 2, \pm 1, 0$	vijf 4d-orbitalen	
		3	4f	$\pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$	zeven 4f-orbitalen	

ψ_{m, l, m_l}	$l \rightarrow 0, 1, 2, \dots, n-1$	$m_l \rightarrow -l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l$	
n	l	m_l	
1	0 $\rightarrow$ 1s	0	$\psi_{1,0,0}$
2	0 $\rightarrow$ 2s	0	$\psi_{2,0,0}$
	1 $\rightarrow$ 2p	-1, 0, +1	$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{2,1,-1} \\ \psi_{2,1,0} \\ \psi_{2,1,1} \end{array} \right.$
3	0 $\rightarrow$ 3s		
	1 $\rightarrow$ 3p		
	2 $\rightarrow$ 3d	-2, -1, 0, +1, +2	$\left. \begin{array}{l} -2 \\ -1 \\ 0 \\ +1 \\ +2 \end{array} \right\} 5 \text{ orbitaalen}$
4	0 $\rightarrow$ 4s		
	1 $\rightarrow$ 4p		
	2 $\rightarrow$ 4d		
	3 $\rightarrow$ 4f		$\rightarrow 7 \text{ orbitaalen}$

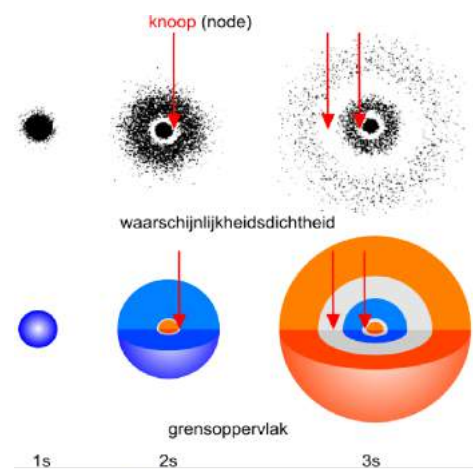
s-orbitaal = orbitaal met $l=0$

p $l=1$
d $l=2$
f $l=3$

7.4.3 De vorm van orbitaalen

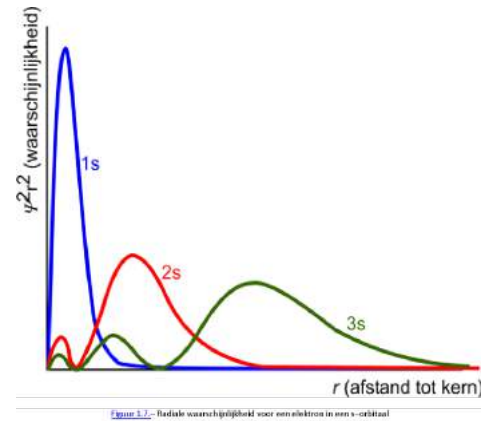
7.4.3.1 s-orbitaalen ($l=0$)

- Waarschijnlijkheidsverdelingen voor een 1s-, 2s- en een 3s-elektron.
- Alle verdelingen zijn bolsymmetrisch en het volume neemt toe met de waarde van n .
- Het is duidelijk dat, voor een 1s-elektron de kans om het elektron te vinden het grootst is bij de kern.
- Voor een 2s- en een 3s-orbitaal worden verschillende gebieden met hoge probabibiliteit gevonden, gescheiden door **nodale oppervlakken** waar de waarschijnlijkheid 0 is.



Figuur 1.6 - Waarschijnlijkheidsdichtheid en grensooppervlak voor 1s-, 2s- en 3s-orbitaalen

- Waarschijnlijkheid om een s-elektron te vinden op een afstand r vd kern in functie vd afstand tot deze kern.
- De waarschijnlijkheid wordt berekend als het product van Ψ^2 en het volume $4\pi r^2$
- Men ziet dat in de kern ($r=0$) en ter hoogte vd nodale vlakken de kans 0 wordt.



Aangezien het elektron zich hoe dan ook ergens rond de kern moet bevinden is de som vd waarschijnlijkheden op elke plaats voor elk orbitaal gelijk aan 1. Men drukt dit

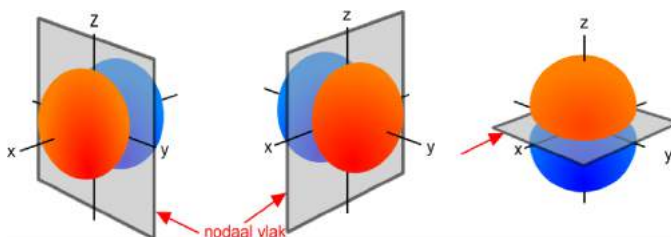
wiskundig uit als: $\int \Psi^2 dV = 1$

Merk op: de waarschijnlijkheid om een elektron te vinden nadert naar 0 bij voldoende grote afstand van de kern, maar deze limietwaarde nooit echt bereikt.

- Men kan echter met een oppervlak een bepaald % van deze totale waarschijnlijkheid insluiten, gewoonlijk neemt men hiervoor 90%.
- Men bekommt een zogenaamd grensooppervlak waarmee we ons een orbitaal handig kunnen voorstellen.

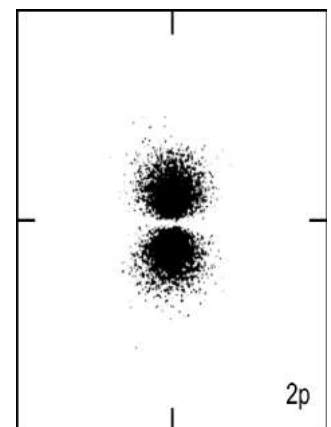
!! De waarschijnlijkheid om een elektron te vinden is niet dezelfde voor elk punt binnen een grensooppervlak

7.4.3.2 p orbitalen ($l=1$)



Er zijn 3 p-orbitalen volgens de waarden vh magnetisch kwantumgetal m_l . Alle orbitalen met $n=2$ en $l=1$ (2p-orbitalen) hebben dezelfde basisvorm.

- Ze bestaan uit 2 lobben die naargelang de waarde vh magnetisch kwantumgetal (-1,0,+1) georiënteerd zijn volgens de x-, de z- en de y-as.
- De 2 lobben worden gescheiden door een nodaal vlak dat door de atoomkern gaat en samenvalt met het vlak loodrecht op de oriëntatierichting vh p-orbitaal. De 3p-orbitalen zijn volumineuzer dan de 2p-orbitalen.

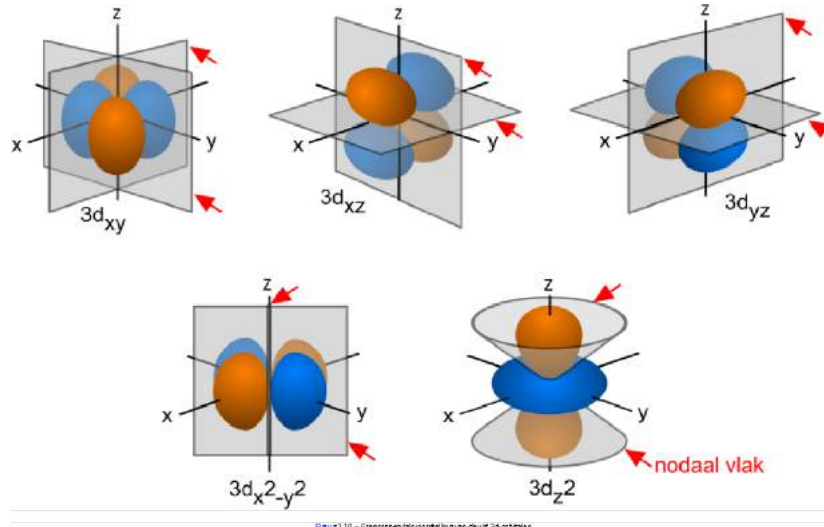


Figuur 1.8 - Waarschijnlijkheidsdichtheid voor een 2p-orbitaal

Elk 3p-orbitaal bevat eveneens een nodaal vlak doorheen de atoomkern maar ook een inwendig nodaalvlak binnen elke lob

7.4.3.3. d-orbitalen ($l=2$)

Er zijn 5 3d-orbitalen volgens de waarden van het kwantumgetal m_l : -2, -1, 0, +1, +2.
4 van 5 orbitalen bezitten 4 lobben.



!! Vergeet niet wat dit voorstelt

→ namelijk een plaats met een reële kans om het elektron terug te vinden tov. de kern

7.4.3.3 f-orbitalen

→ niet

SAMENGEVAT

n : bepaalt de grootte van het grensvlak van de orbitaal

l : bepaalt de vorm van het grensvlak:

- $l=0$: bolsymmetrisch
- $l=1$: dubbele lob
- $l=2$: 4 lobben
- ...

m_l bepaalt de oriëntatie van het grensvlak

7.5 Energietoestanden in H-achtige atomen

7.5.1 Het H-atoom (Z=1)

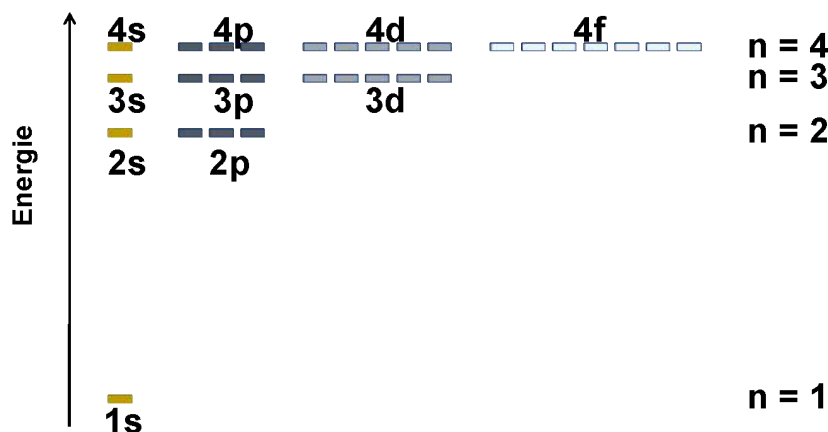
Zoals reeds in 7.2.1 werd aangegeven worden, in afwezigheid van een extern magnetisch veld, de energietoestanden voor het elektron in het H-atoom alleen bepaald door het hoofdkwantumgetal n:

$$E = - \frac{R_H hc}{n^2}$$

- Grondtoestand: n=1
- Aangeslagen toestanden: n>1
- Als n oneindig groot is, is het elektron vrij van de kern en is de energie niet meer gekwantiseerd (ion).

Alle orbitalen gekenmerkt door eenzelfde waarde voor n hebben dezelfde energie en vormen samen een *ontaarde toestand*.

Energiediagram voor het H-atoom buiten een extern magnetisch veld:



$$E = -\text{cte} \times \frac{Z^2}{n^2}$$

Laagste energie

- Dicht bij de kern
- Grootste aantrekkingskracht
- Meest gestabiliseerd

Wat is de relatieve energie van de verschillende orbitalen in een atoom?

- H-atoom: alleen afhankelijk van n
- n > 1: zogenaamde *ontaarde of gedegenererde* toestanden (zelfde E)

In aanwezigheid van een magnetisch veld wordt de ontarding opgeheven volgens de oriëntatie van de orbitalen ten opzichte van het magnetisch veld, dus volgens het magnetisch kwantumgetal m^l. Het p-subniveau wordt hierbij opgesplitst in 3 energieniveaus, het d-subniveau in 5 energieniveaus. Dit verklaart het toegenomen aantal spectraallijnen voor het H-atoom in een magnetisch veld.

7.5.2 H-achtige atomen ($Z > 1$)

Ionen die bestaan uit een kern met kernlading Z en slechts 1 elektron worden H-achtige atomen genoemd. Vb. He^+ , Li^{2+} , ... De orbitalen van deze deeltjes zijn dezelfde als voor waterstof, maar wegens de grotere kernlading zal E_n meer negatief zijn wnr Z toeneemt. Het elektron in de grondtoestand van He^+ , Li^{2+} , ... staat dan ook dichter bij de kern dan in H;

7.6. Het meer-elektronenatoom

Schrödingervergelijking; oplossen wordt moeilijker:

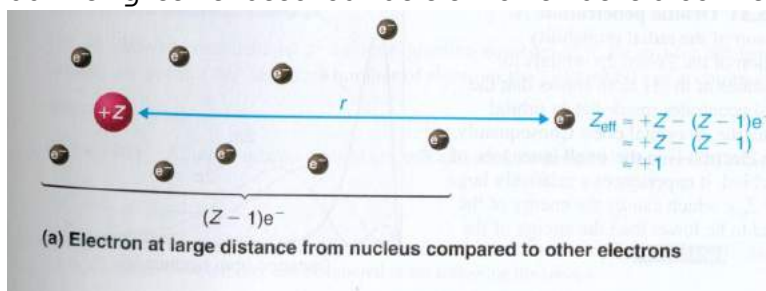
→ kan niet meer exact opgelost worden door complicaties:

- interactie elektron – kern,
- interactie elektron – elektron
-

Aangezien de locatie van elk elektron niet exact gekend is, is het onmogelijk om de afstoting exact te bepalen: “elektroncorrelatieprobleem”

→ men vervangt de lading Z door de **effectieve kernlading Z^***

- $Z^* = Z - \sigma$
- σ = afschermingsconstante: de som vd afschermingen vd kern door elk elektron aanwezig tss het beschouwde elektron en deze atoomkern



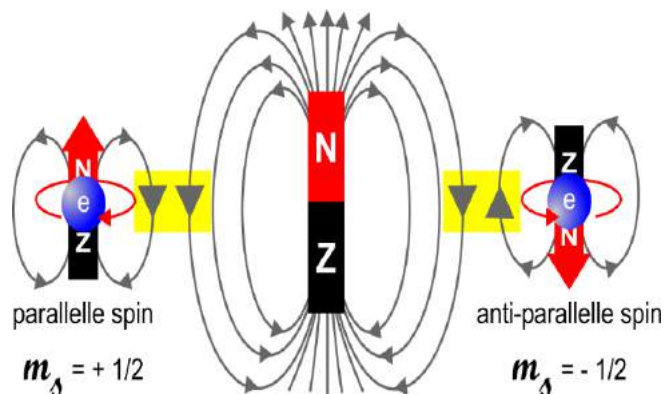
Naast massa en lading heeft het elektron nog een eigenschap die het best als *spin* wordt beschreven:

→ het elektron spint omheen zijn eigen as en verwekt aldus een eigen magneetveld.

Tov een uitwendig magneetveld kan de spin vh elektron dan een parallelle of een anti-parallelle oriëntatie aannemen die gekarakteriseerd wordt door het spinkwantumgetal m_s : $m_s = +1/2$ of $-1/2$

→ de elektron spin is dus ook gekwantiseerd

Orbitaal : ψ_{n,l,m_l}
Elektron: (n,l,m_l,m_s)
Bv. $(1,0,0,+1/2)$



Met deze spiegeigenschap van elektron kon men het opsplitsingspatroon en de spatiering van spectraallijnen in de atoomspectra, opgenomen in uitwendig magneetveld verklaren.

Het erkennen van (gekwantiseerd) elektron spin betekent dat een elektron in een atoom volledig beschreven wordt door 4 kwantumgetallen: n, l, m_l, m_s .

Uit de atoomspectra blijkt dat de energietoestanden van een meer-elektronenatoom nu gekwantiseerd zijn volgens de kwantumgetallen n en l en uitgedrukt moeten worden met $E_{n,l}$.

Wegens de effecten van afscherming en de verschillende vorm van orbitalen met zelfde n en verschillende l , zijn in een atoom met meerdere elektronen de verschillende subniveaus niet langer gedegenereerd. De energie wordt nu uitgedrukt door $E_{n,l}$. Binnen elk hoofdniveau neemt de energie toe volgens: $ns < np < nd < nf$

De lagere energie voor een s-elektron tov een p-elektron of d-elektron komt doordat een s dichter bij de kern kan aangetroffen worden dan een p- of een d-elektron.

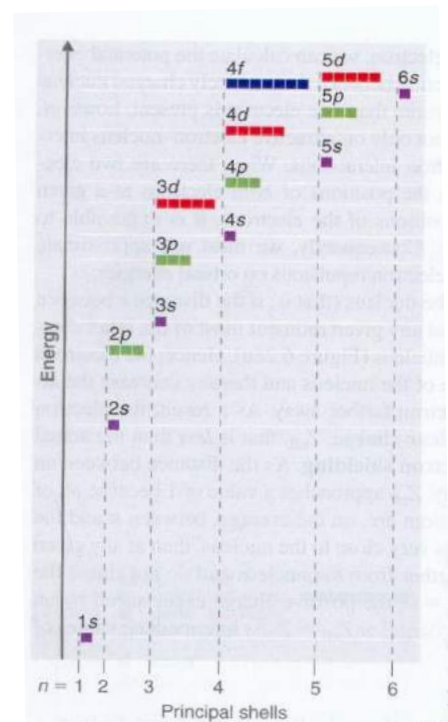
→ Daardoor voelt het als het s-elektron een groter kernlading dan een p- of een d-elektron van hetzelfde niveau en heeft het een lagere energie. De afschermingsconstante σ voor een bepaald elektron wordt volgens bepaalde regels berekend.

Door deze aanpassing beweegt een gegeven elektron in een meer-elektronenatoom zich in een potentieel-energieveld bepaald door Z^* . De bekomen orbitalen hebben echter precies dezelfde vorm als de H-orbitalen, maar Z moet in elke vergelijking vervangen worden door Z^* .

Energie bepaald door $n+l$

In magneetveld:

- ook in de subshillen verschillende energieën
- én een bijkomende fijnstructuur: 4e kwantumgetal "spinkwantumgetal m_s ".



H8: ATOOMSTRUCTUUR 2

8.1 Het Aufbau-principe

Hoe worden de elektronen over de orbitalen verdeeld?

8.1.1 Het uitsluitingsprincipe van Pauli

= "Pauli-verbod"

In eenzelfde atoom kunnen 2 elektronen niet dezelfde 4 kwantumgetallen hebben

- per orbitaal max. 2 elektronen
- spinkwantumgetal m_s moet verschillen ($-\frac{1}{2}$ of $\frac{1}{2}$)

8.1.2 Opvullen van een subniveau

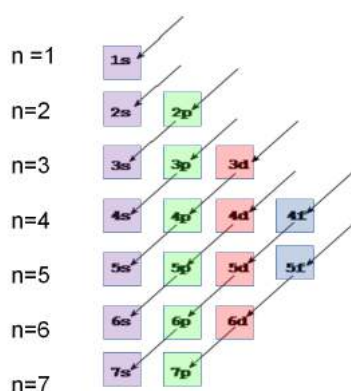
= "Regel van Hund"

In een subniveau met een stel energetisch gedegenererde orbitalen wordt de elektronenbezetting met de laagste energie bekomen als een maximaal aantal elektronen een parallelle spin heeft.

	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$	
$1 e^-$	$\uparrow$			1 ongepaard e^-
$2 e^-$	$\uparrow$	$\uparrow$		2 ongepaarde e^-
$3 e^-$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	3 ongepaarde e^-
$4 e^-$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	2 ongepaarde e^-
$5 e^-$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	1 ongepaard e^-
$6 e^-$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	0 ongepaarde e^-

volgorde waarin de subniveau's in een atoom met elektronen worden opgevuld (laagste naar hoogste energie):

8.2 De elektronenconfiguratie van atomen



→ bv. Na heeft 11 elektronen

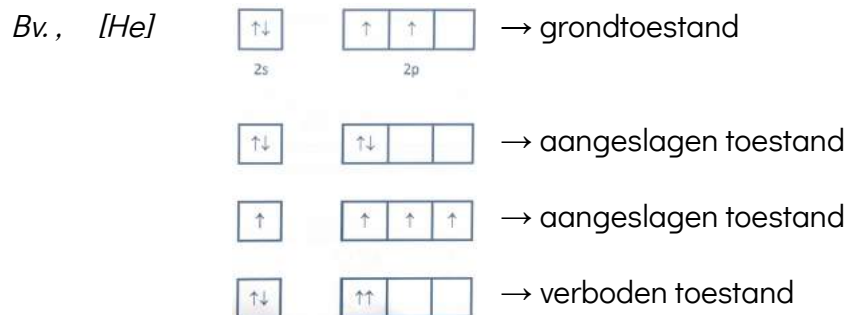
- $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
- kan je ook schrijven als $[\text{Ne}] 3s^1$
 - $[\text{Ne}]$ staat voor de elektronenconfiguratie van Ne
 - 3s elektron is het **valentie-elektron** (hoogste waarde van n, namelijk 3)
 - de elektronen in $[\text{Ne}]$ zijn de **core-elektronen**

Je kan de elektronenbezetting ook op een alternatieve wijze weergeven, met behulp van de orbitaaldiagrammen:



opmerking

- **grondtoestand:** laagste energiebezetting + Pauli-verbod + regel van Hund
- **aangeslagen toestand:** Pauli-verbod, maar niet laagste energiebezetting of niet volgens regel van Hund
- **verboden toestand:** niet volgens Pauli-verbod



8.3 Bijzondere elektronenconfiguraties

Voor bepaalde elementen worden afwijkende elektronenconfiguraties vastgesteld

- experimenteel komen we tot andere elektronenconfiguraties dan we zouden verwachten volgens Aufbau

8.4 Periodiek systeem

- Binnen eenzelfde groep vertonen de elementen analoge chemische eigenschappen en hebben ze een identieke bezetting van de valentieschaal.
- Binnen eenzelfde periode waarbij de chemische eigenschappen systematisch veranderen worden de orbitalen van eenzelfde niveau stapsgewijs met elektronen gevuld

⇒ Er bestaat een unieke band tussen de chemische eigenschappen van een element en de elektronenconfiguratie

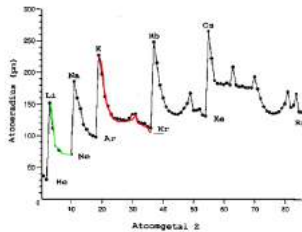
1s							1s
2s							2p
3s							3p
4s	3d						4p
5s	4d						5p
6s	5d	4f					6p
7s	6d	5f					7p

8.5 Periodiciteit van atomeigenschappen

8.5.1 Atoomstraal

Voor metalen is de metaalstraal gelijk aan de helft van de afstand tussen 2 metaalatoomkernen in het zuiver metaal

Voor niet-metalen is de covalente straal gelijk aan de helft van de afstand tussen de atoomkernen in de diatomische molecule.



- Binnen 1 periode neemt de radius af van links naar rechts
- Binnen 1 groep neemt de straal toe van boven naar beneden

verklaring:

Volgens Bohr is de straal evenredig met n^2/Z of beter met n^2/Z^*

1. Binnen periode ($n = \text{cte}$)
 - toename Z^*
 - grotere aantrekking,
 - afname volume
2. Binnen dezelfde groep (n neemt toe van boven naar onder)
 - Z^* blijft voor elektronen in de valentieschaal min of meer constant
 - de straal neemt toe

8.6 De ionisatie-energie E_i

= de minimale energie nodig om een elektron te verwijderen uit een gasvormig atoom in de grondtoestand

⇒ grote E_i : elektron is sterk gebonden

- altijd positief want het vereist energie

E_{i1} → energie nodig om het eerste elektron uit de valentieschaal te verwijderen

vaststellingen

1. edelgassen met ns^2np^6 elektronenconfiguratie hebben een hoge E_{i1}
→ edelgassen geven moeilijk elektronen af
2. E_{i1} is hoog voor niet-metalen, laag voor metalen
→ metalen (links) hebben weinig valentie-elektronen en willen dus hier van af om de edelgasconfiguratie te bereiken → weinig energie nodig
→ niet-metalen hebben al veel elektronen en ze moeten er juist afgeven voor de edelgasconfiguratie dus gaan deze dus niet makkelijk afgeven → veel energie nodig
3. binnen eenzelfde periode neemt E_{i1} toe van links naar rechts
→ dezelfde uitleg als hierboven
→ meer valentie-elektronen ⇒ meer energie nodig om 1 af te nemen
4. binnen eenzelfde groep neemt E_{i1} af van boven naar onder
→ verder van de positieve kern ⇒ minder aantrekking

speciale kenmerken

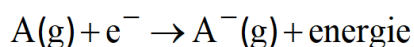
- een volledig gevuld s-subniveau s^2 is relatief stabiel
- een halfgevuuld p-subniveau heeft eveneens een extra stabiliteit (s^2p^3)

De energieën, nodig om een tweede of een derde elektron te verwijderen (E_{i2} , E_{i3} , ...) zijn groter dan E_{i1} . De reden is de toenemende positieve lading van het atoom waaruit de volgende elektronen moeten verwijderd worden.

→ van zodra een elektron wordt verwijderd uit de core, neemt E_{in} zeer sterk toe door de toenemende Z^*

8.7 De elektronaffiniteit E_{ea}

De elektronaffiniteit E_{ea} van een element is de energie die vrijkomt als een gasvormig atoom in de grondtoestand een elektron opneemt en een negatief geladen ion vormt.



- E_{ea} kan zowel positief (exotherm proces) als negatief (endotherm proces) zijn
- Negatieve E_{ea} waarden: bij edelgassen en bij ns^2np^6 configuraties
 - die verdwijnen door opname van een elektron
- Positieve E_{ea} waarden: bij de meeste andere
- E_{ea} N-groep < E_{ea} O- en F-groep ⇒ extra stabiliteit vd ns^2np^3 -configuratie
- E_{ea} daalt in een groep van boven naar beneden
 - verder vd kern ⇒ aantrekking zwakt af

opmerkingen

- !!!! E_{ea} van $A(g) = -E_i$ van $A^-(g)$
- iso-elektronisch = atomen of ionen van verschillende elementen die hetzelfde aantal elektronen rond de kern hebben (bv. Ne en Mg^{2+})

H9: GASSEN

9.1 Gaswetten

Druk: eenheden

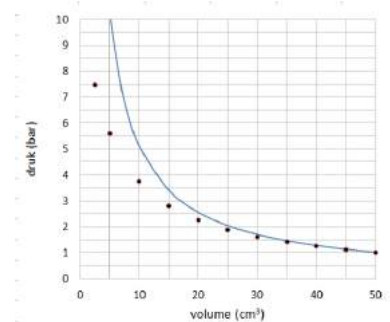
- SI-eenheid: pascal (Pa)
- $1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2$
- atmosfeer: $1 \text{ atm} = 1,01325 \cdot 10^5 \text{ Pa}$
- mmHg = 1/760 atm
- $1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$

9.1.1 Wet van Boyle: verband tussen druk en volume

→ Bij een constante temperatuur is het volume ingenomen door een gas omgekeerd evenredig met de druk

→ $V \propto \frac{1}{P}$ of $PV = \text{cte}$ (bij cte T)

→ verklaring: bij afnemend volume zal het aantal botsingen per oppervlakte-eenheid toenemen en dus ook de druk



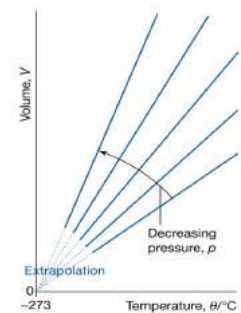
9.1.2 Wet van Charles: verband tussen volume en temperatuur

→ $V \propto T$ of $\frac{V}{T} = \text{cte}$ (bij cte P)

→ $T(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273,15$

absoluut nulpunt: punt waar alle rechten snijden

→ temperatuur waarbij een hoeveelheid stof geen volume inneemt



9.1.3 Wet van Avogadro: verband tussen volume en stofhoeveelheid

→ Onder dezelfde voorwaarden van druk en temperatuur wordt het volume van een gas alleen bepaald door het aantal moleculen (of het aantal mol) en is onafhankelijk van de aard van het gas

→ $V \propto n$ of $\frac{V}{n} = \text{cte}$ (Bij T en P cte)

!!! Bij 1 atm en 0°C (normomstandigheden) neemt 1 mol van om het even welk gas een volume in van 22,4136L.

9.1.4 Wet van Amonton: verband tussen druk en temperatuur

→ Bij constant volume is de druk van een welbepaalde hoeveelheid gas recht evenredig met de absolute temperatuur

→ $P \propto T$ of $\frac{P}{T} = \text{cte}$ (bij constante V)

9.2 De ideale gaswet

Uit vorige wetten

$$\Rightarrow PV = nRT$$

- P (atm) & V(L) $\Rightarrow R = 0,08206 \text{ L.atm/mol}$
- P(Pa) & V(m³) $\Rightarrow R = 8,314 \text{ J/(mol.K)}$

9.3 De dichtheid van gas

$$n = \frac{m}{M} \quad \& \quad \rho = \frac{m}{V} \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{PM}{RT}$$

9.5 Gasmengsels en partiële drukken

Omdat de gassen in een mengsel geen invloed op elkaar uitoefenen zal elke component in een gasmengsel waarvan de componenten niet met elkaar reageren een druk uitoefenen alsof deze alleen in het beschouwde volume aanwezig is.

Dalton: wet van de additiviteit van de partiële drukken

- = in een mengsel van niet met elkaar reagerende gassen is de totale druk gelijk aan de som van de partiële drukken van elke component

$$P_i = x_i \times P_{\text{tot}}$$

→ de partiële druk van een fgas in een mengsel is gelijk aan het product van de totaal druk met de molfractie in de gasfase

9.6 Kinetische gastheorie

Het meest eenvoudige model voor het beschrijven van het gedrag van gassen is de zogenaamde kinetische moleculaire gastheorie

1. Gas= groot aantal deeltjes, moleculen (mono-of polyatomisch) in voortdurende beweging
2. Afstand tussen deeltjes veel groter dan afmetingen: volume deeltjes te verwaarlozen
3. Geen interacties (aantrekkend of afstotend)
4. Moleculen botsen onderling en tegen wand. Botsingen elastisch: gemiddelde kinetische energie van de deeltjes is constant
5. Gemiddelde kinetische energie van de deeltjes is alleen afhankelijk van de temperatuur; bij een gegeven T is de gemiddelde kinetische energie van alle deeltjes gelijk.

De snelheid van de gasmoleculen is bij kamertemperatuur van de grootteorde 500 m/s. Deze gemiddelde waarde neemt toe met de temperatuur evenals de graad van spreiding rondom de meest voorkomende waarde.

H10: CHEMISCHE BINDING

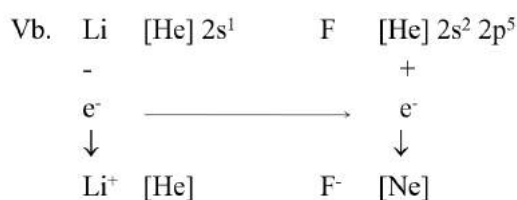
10.1 De ionbinding

- tussen metaal en niet metaal
- gevolg van lage E_i van metalen en hoge E_{ea} van niet-metalen

De vorming van ionen, door opname of afstaan van elektronen, is een middel om te voldoen aan het streven van de elementen naar een stabiele elektronenconfiguratie.

ionbinding

- Kationen (positieve ionen) en anionen (negatieve ionen)
- Gerangschikt in een vast geometrisch patroon in een kristal waarin positieve en negatieve ionen elkaar aantrekken
- De formule-eenheid van een ionaire verbinding is de minimale formule: eenvoudigste verhouding tussen kation en anion
- De drijvende kracht voor het tot stand komen van ionaire verbindingen is het streven van elk element naar een stabiele edelgasconfiguratie



10.1.1 Soorten stabiele ionen

- Bij het vormen van een kation worden de elektronen altijd verwijderd uit de elektronenschil met de hoogste n-waarde
- Binnen die n meerdere sub-schillen aanwezig ⇒ verwijderd uit het orbitaal met de hoogste l-waarde

Ionen met edelgasconfiguratie

- **1s²**: [He] Li⁺, Be²⁺, H⁺
- **ns²np⁶**: bv. [Ar] K⁺, Ca²⁺, ...

Ionen met pseudo-edelgasconfiguratie

- **nd¹⁰**: bv. Cu⁺, Cd²⁺, Tl³⁺
- **nd¹⁰(n+1)s²**: bv. As³⁺, Sn²⁺, Pb²⁺

Andere elektronenconfiguraties

10.1.2 Ionstraal

- Een positief ion is altijd kleiner dan het overeenkomstig neutraal element: door het verlies van het buitenste elektron zal de gelijk gebleven kernlading de overblijvende elektronen dichter naar zich toe trekken.
- Een negatief ion is altijd groter dan het overeenkomstig neutraal element: door het bijkomend elektron wordt de afstoting tussen de valentie-elektronen groter, gevolg: grotere orbitalen.
- Iso-elektronische ionen: gelijk aantal elektronen: r neemt af met stijgende Z
Straal $O^{2-} > F^- > Na^+ > Mg^{2+} > Al^{3+}$

10.1.3 Energetische aspecten

ionbinding

⇒ ladingseparatie (positieve en negatieve lading)

⇒ bindende kracht waarvoor de energie gegeven wordt door: $E = k \cdot (q_1 \times q_2) / r$

interactie-enthalpie = energie die vrijkomt wanneer bv. 1 mol gasvormige Na^+ - en 1 mol gasvormige Cl^- -ionen van op een oneindige afstand bij elkaar komen met vorming van 1 mol vast NaCl

↔ **roosterenthalpie** $\Delta_{rooster} H$ = de energiehoeveelheid nodig om 1 mol NaCl bv. te splitsen in 1 mol Na^+ (g) en 1 mol Cl^- (g)

AANVULLEN UIT LESOPNAMES

10.2 De covalente binding

→ tussen niet-metalen

→ gevolg van hoge E_i én hoge E_{ea}

lewisvoorstelling

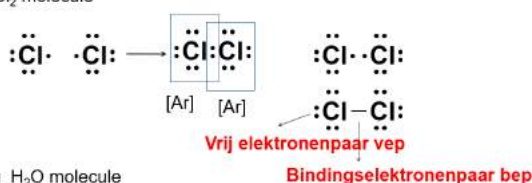
1. eerste vier valentie-elektronen worden afzonderlijk geplaatst
2. vanaf vijfde elektron worden paren gevormd

⇒ Men suggereert 4 elektronenparen (8 e^- = octet)

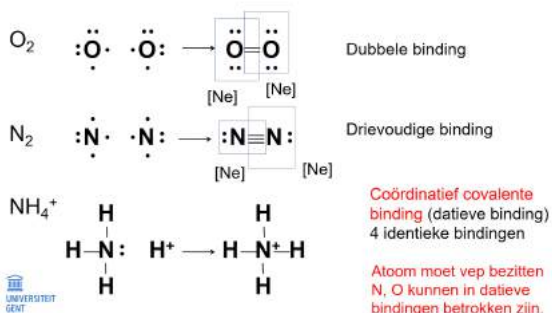
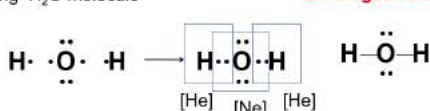
⇒ Bij een covalente binding zal een atoom evenveel covalente bindingen aangaan als er ongepaarde elektronen zijn in de valentieschil

- een bindend elektronenpaar (bep) wordt voorgesteld door een streepje tussen de betrokken atomen
- een vrije elektronenparen (vep) worden voorgesteld door afzonderlijke stippen, horend bij 1 atoom

Vorming Cl_2 molecule



Vorming H_2O molecule



10.3 Lewisstructuren van moleculen en ionen

1. Rangschik de atomen t.o.v. elkaar.
 - Centraal atoom = atoom met laagste EN
 - gewoonlijk eerste in formule vb.: CCl_4 , CO_3^{2-}
 - H, halogenen: slechts aan 1 atoom gebonden
 - H en F-atoom kunnen nooit het centraal atoom zijn
 - C, N, S en P vaak centraal atoom
2. Bepaal het totaal aantal valentie-elektronen
 - negatief ion: extra elektronen vb. CO_3^{2-} : + 2 elektronen
 - positief ion : verminderen aantal elektronen vb. NH_4^+ : - elektron
3. Plaats een bindingselektronenpaar tussen elk paar naburige atomen
4. Plaats bij elk eindstandig atoom voldoende vrije elektronenparen opdat ze de octetstructuur bereiken (voor H: 2 elektronen)
 - zijn er elektronen over, plaats deze rond het centraal atoom
5. Indien het centraal atoom in dit stadium de octetstructuur niet bereikt heeft, gebruik vrije elektronenparen van de eindstandige atomen om meervoudige bindingen te vormen

bv. H_2O

1. Structuur
H = eindstandig, O = centraal atoom **H O H**
2. Bepaal het totaal aantal valentie-elektronen
H : 2 x 1 elektron totaal : **8 elektronen**
O : 1 x 6 elektronen
3. Plaats een bindingselektronenpaar tussen elk paar naburige atomen
H – O – H
4. Plaats bij elk eindstandig atoom voldoende vrije elektronenparen opdat ze de octetstructuur bereiken (voor H: 2 elektronen)
H – O – H
5. Plaats de overblijvende elektronen rond het centraal atoom
H – $\ddot{\text{O}}$ – H

10.4 Formele lading

- Soms zijn er meer dan één lewisstructuur voor dezelfde molecule.
- Niet altijd allemaal even waarschijnlijk.
- Meest waarschijnlijke structuur: identificeren mbv formele ladingen van de atomen.

Formele lading:

→ de lading die het bezit nadat de elektronen van elke binding in de molecule gelijk verdeeld werden tussen de atomen in elke binding

= aantal elektronen rond vrije atoom - aantal elektronen rond atoom in verbinding

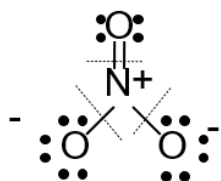
= aantal elektronen elektronen rond vrije atoom -(aantal elektronen in vep + $\frac{1}{2}$ aantal elektronen in bep)

= $ve - vep - \frac{1}{2} bep$

$$FL = (\text{valentie} - \text{elektronen}) - (\text{niet} - \text{bindende } e^- + \frac{\text{bindings } e^-}{2})$$

- Som FL in de verbinding = lading van de verbinding
- Elektronen rond een atoom in een verbinding
 - o vrije elektronenparen rond een atoom behoren tot het atoom
 - o bindingselektronenparen worden gelijk verdeeld tussen de gebonden atomen

vb. NO_3^-



O : 6 e^- , normaal 6 e^- : FL = 0

O : 7 e^- , normaal 6 e^- : FL = -1

N : 4 e^- , normaal 5 e^- : FL = +1

Bij niet-equivalente, geladen lewisstructuren worden deze verkozen waarin:

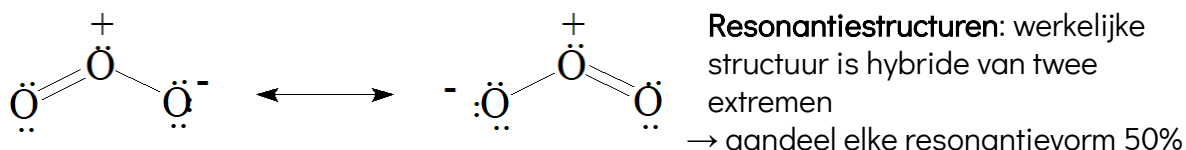
- de atomen de kleinste formele lading dragen
- de negatieve formele ladingen toegekend worden aan de meest elektronegatieve atomen

10.5 Resonantie

Soms zijn meerdere lewisstructuren mogelijk voor een bepaalde verbinding.

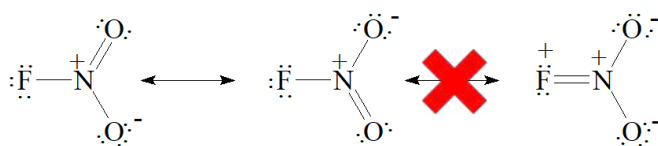
Komt voor bij moleculen, polyatomische ionen met dubbele bindingen + enkelvoudige bindingen naar het centraal atoom.

bv. Ozon O_3

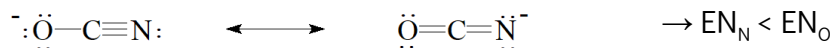


De beoordeling van het gewicht van een resonantievorm in de resonantiehybride verloopt volgens bepaalde criteria

1. De atoomsequentie is in alle resonantievormen dezelfde
2. Geen formele lading met hetzelfde teken op twee naburige atomen



3. Zo weinig mogelijk formele ladingen (aantal en waarde)
→ kleinst aantal formele ladingen én lage formele ladingen ⇒ groter aandeel in de resonantiehybride
4. Formele ladingen conform met elektronegativiteit



opmerking: kanoniekeken = resonantiestructuren

10.6 Uitzondering op de octetregel

3 mogelijkheden

10.6.1 Elektronedeficiënte moleculen

Moleculen waarin één of meer atomen met minder dan 8 elektronen zijn omringd

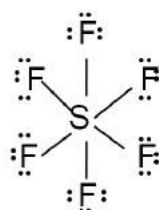


→ B heeft slechts 6 e⁻ rond zich

10.6.2 Geëxpandeerde valentieschaal

Moleculen waarin één of meer atomen met meer dan 8 elektronen zijn omringd

→ **Valentieschaal expansie:** Elementen van de derde periode hebben 3d orbitalen die ook in bindingen kunnen betrokken worden

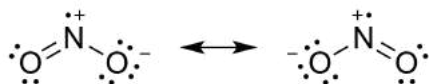


→ S heeft 10 e⁻ rond zich door deelname van 3d-orbitalen van S

10.6.3 Moleculen met een oneven aantal elektronen (radicalen)

Moleculen hebben een oneven aantal elektronen dus kunnen onmogelijk een structuur bezitten waarin aan de octetstructuur voldaan is.

NO₂ : 17 elektronen hoe te verdelen?



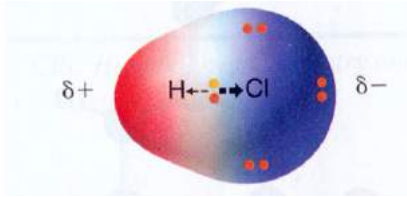
Chemische stoffen die een vrij elektron bevatten noemt men (vrije) radicalen.

10.7 Ruimtelijke structuur van moleculen

slides!!!!

10.8 Moleculaire polariteit

10.8.1 Polariteit en elektronegativiteit



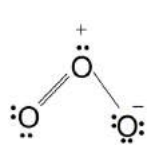
Het elektronenpaar wordt gedeeld, 1 van de bindende partners oefent er een grote aantrekkingskracht op uit zodat een intermediaire situatie ontstaat. Het resultaat is een **polaire covalente binding**.

10.9 Eigenschappen van de covalente binding: orde, lengte en energie

10.9.1 Bindingsorde

= het aantal elektronenparen dat gedeeld wordt door 2 atomen in een molecule

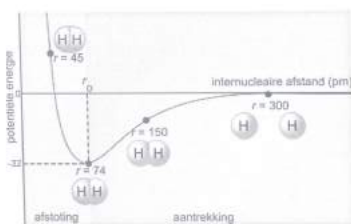
$$= \frac{\text{aantal elektronenparen in alle } X-Y\text{-bindingen}}{\text{aantal } X-Y\text{-bindingen}}$$



bv. O_3

- aantal elektronenparen: 3
- aantal bindingen: 2
- $\Rightarrow$ orde = $3/2$

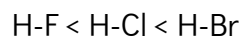
10.9.2 Bindingslengte



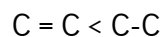
Figuur 10.10 – Vorming van de covalente binding tussen twee waterstofatomen

een minimum in de energiecurve ontstaat bij de zogenaamde **covalente bindingsafstand**

- het gaat hier om gemiddelde waarden!!



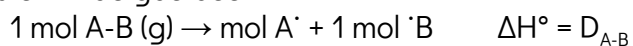
- hoe meer schillen, hoe ver de afstand



- hoe meer bindingen, hoe minder ver de afstand

10.9.3 Bindingsenergie D - bindingsdissociatie-enthalpie

= standaard enthalpieverandering bij homolytisch breken van de binding in één mol moleculen in de gasfase:



1. De bindingsenergie voor een bepaalde binding is gewoonlijk een gemiddelde waarde, aangezien de bindingssterkte lichtjes verschilt van verbinding tot verbinding
2. D neemt toe met het aantal covalente bindingen (bindingsorde) tussen de 2 atomen
3. D neemt af met de periode n waartoe de elementen behoren
4. D neemt toe voor elementen binnen dezelfde groep

1		3		4																										
<table><tr><th>H-C binding in</th><th>D / kJ.mol⁻¹</th></tr><tr><td>H-CF₃</td><td>430</td></tr><tr><td>H-CCl₃</td><td>380</td></tr><tr><td>H-CBr₃</td><td>378</td></tr></table>	H-C binding in	D / kJ.mol ⁻¹	H-CF ₃	430	H-CCl ₃	380	H-CBr ₃	378	<table><tr><th>X-X</th><th>D / kJ.mol⁻¹</th></tr><tr><td>F-F</td><td>155</td></tr><tr><td>Cl-Cl</td><td>240</td></tr><tr><td>Br-Br</td><td>190</td></tr><tr><td>I-I</td><td>149</td></tr></table>	X-X	D / kJ.mol ⁻¹	F-F	155	Cl-Cl	240	Br-Br	190	I-I	149	<table><tr><th>H-X</th><th>D / kJ.mol⁻¹</th></tr><tr><td>H-F</td><td>565</td></tr><tr><td>H-Cl</td><td>428</td></tr><tr><td>H-Br</td><td>362</td></tr><tr><td>H-I</td><td>295</td></tr></table>	H-X	D / kJ.mol ⁻¹	H-F	565	H-Cl	428	H-Br	362	H-I	295
H-C binding in	D / kJ.mol ⁻¹																													
H-CF ₃	430																													
H-CCl ₃	380																													
H-CBr ₃	378																													
X-X	D / kJ.mol ⁻¹																													
F-F	155																													
Cl-Cl	240																													
Br-Br	190																													
I-I	149																													
H-X	D / kJ.mol ⁻¹																													
H-F	565																													
H-Cl	428																													
H-Br	362																													
H-I	295																													

H11: GECONDENSEERDE FASEN

= de vloeistoffase + de vaste fase

11.1 Fysische toestanden en faseveranderingen

Aggregatietoestand:

potentiële energie ↔ kinetische energie

1. Reële gassen, vloeistoffen, vaste stoffen: tussen deeltjes bestaan er intermoleculaire interacties (OAK: onderlinge aantrekkingskracht) :sterkte afhankelijk van aard van de molecule (samenstelling, structuur). Geven een zeker bedrag aan potentiële energie E_{pot} aan de moleculen.
2. Deeltjes bezitten kinetische energie E_{kin} . Deze energie zit vervat in verschillende soorten bewegingen:
 - translatie (bewegen door de ruimte)
 - rotatie (rotatie van atomen, groepen rond bindingen in de molecule zelf)
 - vibratie (beweging rond evenwichtspositie)

Gas: kinetische energie >> interactie-energie

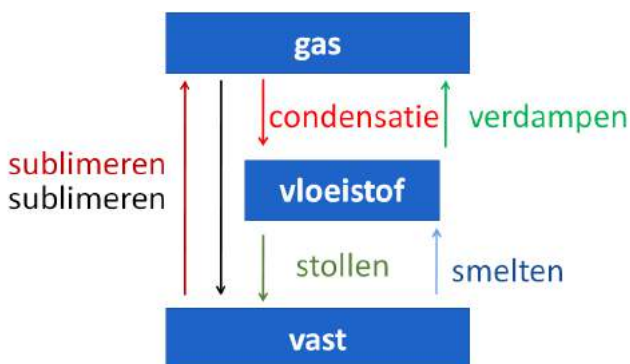
Vloeistof: kinetische energie ≥ interactie-energie

Vast: kinetische energie << interactie-energie

Eigenschappen van stoffen volgens hun aggregatietoestand

	translatie	rotatie	vibratie	vorm	volume
gas	ja	ja	ja	vrij	vrij
vloeistof	Ja (soms beperkt)	ja	ja	vrij	vast
vast	nee	nee	beperkt	vast	vast

faseveranderingen:



- bij cte druk, welbepaalde T
- enthalpieverandering:
 - **exotherm**
 - condensatie
 - stollen
 - (de)sublimatie ($g \rightarrow vl$)
 - **endotherm**
 - verdampen
 - smelten
 - sublimeren ($vl \rightarrow g$)

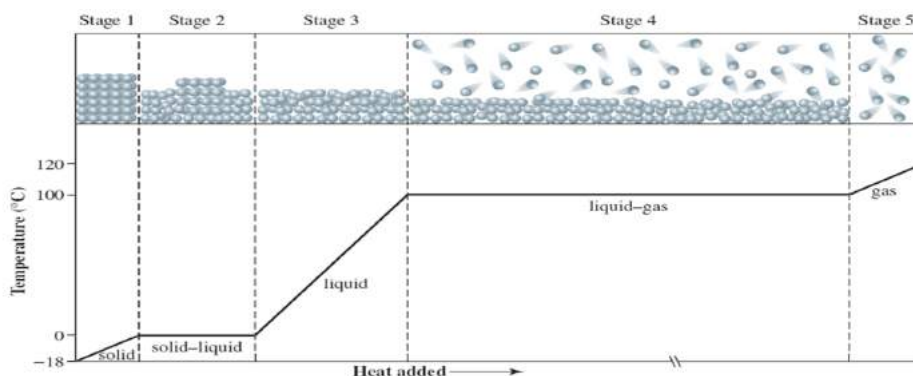
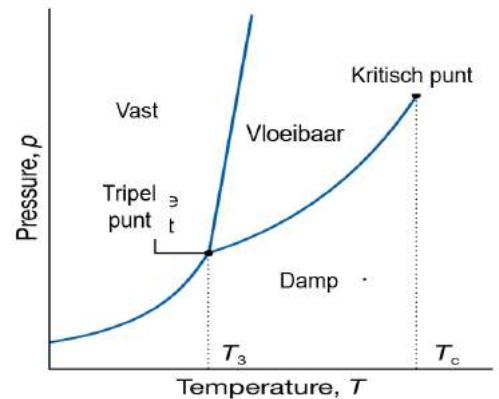
11.2 Kook- en smeltpunten

kookpunt = de temperatuur waarbij de gemiddelde kinetische energie voldoende groot is om de onderlinge aantrekkingskrachten tussen de deeltjes, te overwinnen.

- normale kookpunt/smelpunt: bij 1 atm
- standaard kookpunt/smelpunt: bij 1 bar

Waarde van kook- en smelpunt zijn een maat voor de sterkte van de intermoleculaire interacties : hoe hoger het kookpunt, hoe sterker de interacties.

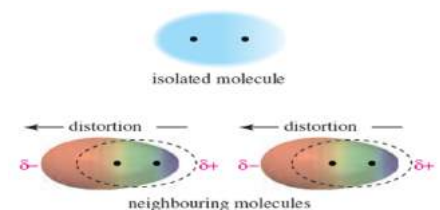
- Gebied: 1 fase stabiel
- Lijn: combinatie van P en T waarbij 2 fasen in evenwicht zijn
 - vast-vloeistof: smeltlijn
 - vast-gas : sublimatielijn
 - vloeibaar-gas : dampdruklijn
- Kritisch punt: eindpunt dampdruklijn
- Tripelpunt: 3 fasen in evenwicht



11.3 Intermoleculaire aantrekkingskrachten

Intermoleculaire krachten = aantrekkingskrachten tussen deeltjes (tussen moleculen onderling of tussen moleculen en ionen)

- Zwakker dan intramoleculaire interacties (bindingen)
- Bepalend voor bulk eigenschappen zoals smelpunt, kookpunt, ..
- Elektrostatisch van aard
 - o Ion-dipool
 - o Dipool-dipool
 - o Dipool-geïnduceerde dipool
 - o Geïnduceerde dipool - geïnduceerde dipool
= (London)dispersiekrachten
 - o Waterstofbrug



⇒ Vanderwaalse interacties: alle interacties tussen NIET geladen deeltjes

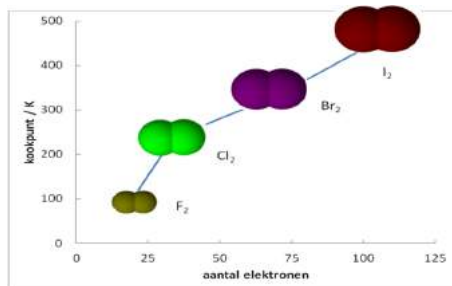
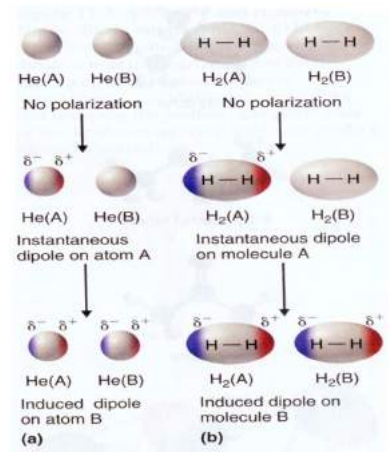
11.3.1 London dispersie interacties

= Geïnduceerde dipool - geïnduceerde dipool

→ elektronenwolk binnen een molecule tijdelijk en kortstondig niet meer symmetrisch rond het zwaartepunt van de positieve kernen ⇒ tijdelijke dipool, deze induceert een andere nabije molecule

⇒ deze positieve en negatieve deel-ladingen trekken elkaar aan: dit is de interactie

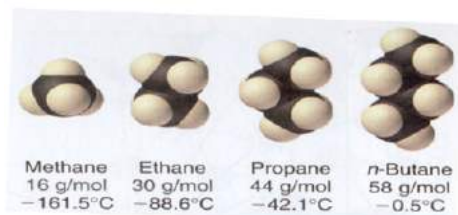
- Tussen alle moleculen in alle stoffen
- Elektrostatisch van aard
- Zwakker dan ion-ion interacties
- Nemen snel af met afstand tussen de deeltjes
→ enkel voelbaar op zeer korte afstand
- Nemen toe met de grootte vd elektronenwolk
→ hoe groter, hoe meer polariseerbaar
- Hoe gemakkelijker de elektronenwolk wordt vervormd, (grotere polariseerbaarheid) des te gemakkelijker ontstaat een dipoolmoment
→ interactie neemt toe met polariseerbaarheid



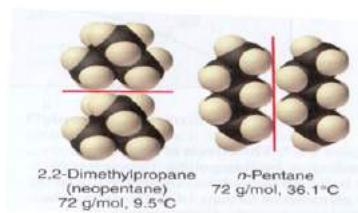
Grotere molecule
⇒ Grotere elektronenwolk
⇒ Grotere polariseerbaarheid
⇒ Sterkere Londondispersiekracht
⇒ Hoger kookpunt

Koolwaterstoffen (= verbindingen met enkel C en H atomen) hebben een hoger kookpunt als hun contactoppervlak vergroot

Invloed molaire massa:

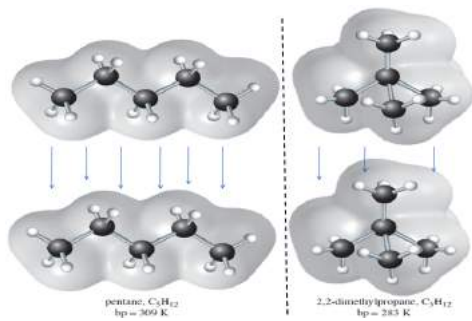


Invloed geometrie:



grotere molaire massa
⇒ grotere londondispersiekrachten
⇒ hoger kookpunt

groter contact-oppervlak
⇒ meer interactie
⇒ hoger kookpunt



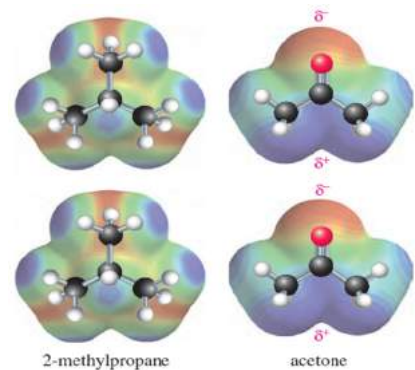
Lineaire molecule
 $\Rightarrow$ groter contactoppervlak
 $\Rightarrow$ hoger kookpunt
 $\Rightarrow$ grotere Londondispersiekracht

kookpunt: -11,7°C 56°C

11.3.2 Dipool-dipool interacties

Moleculen hebben vergelijkbare londondispersiekrachten, maar vanwaar dan het groot verschil in kookpunt?

- $\Rightarrow$ aceton is een apolaire molecule, terwijl 2-methylpropan een polaire molecule is
- 2 moleculen aceton trekken elkaar dus aan en hier zijn dus zowel londondispersiekrachten aanwezig al dipool-dipool interacties
- in 2-methylpropan enkel londondispersiekrachten aanwezig



Polaire moleculen: intermoleculaire kracht is combinatie van dipool-dipool en London interacties.



Moleculen met permanent dipoolmoment p.

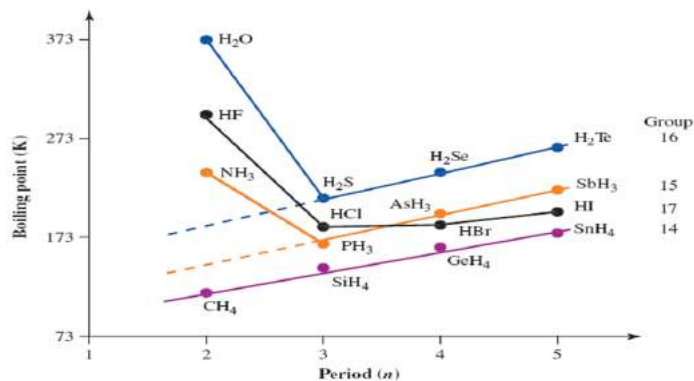
- Elektrostatisch van aard
- Zwakker dan ion-ion interacties
- Nemen snel af met afstand tussen deeltjes

Invloed van het dipoolmoment op het kookpunt van enkele verbindingen

	formule	M / g.mol ⁻¹	p / D	Kookpunt / K
Propan	$CH_3CH_2CH_3$	44,09	0,08	231
Dimethylether	CH_3OCH_3	46,07	1,30	248
Methylchloride	CH_3Cl	50,48	1,87	249
Acetaldehyde	CH_3CHO	44,05	2,69	294
Acetonitrile	CH_3CN	41,05	3,92	355

- $\Rightarrow$ massa ongeveer gelijk (elektronenwolk dus ook)
- $\Rightarrow$ dipool moment neemt toe van onder naar boven
- $\Rightarrow$ kookpunt volgt dit

11.3.3 De waterstofbrug

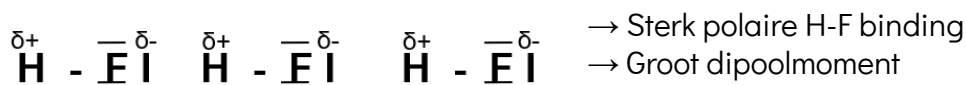


→ hoe meer elektronen
→ hoe hoger kookpunt
→ $n \sim$ kookpunt

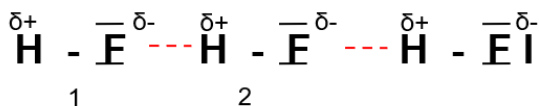
MAAR: Experimenteel:

→ moleculen met H gebonden op sterk elektronegatieve atomen (F, O, N en in mindere mate Cl) vertonen extreem hoge intermoleculaire interacties

Verklaring: Sterke polariteit van de H-X binding leidt tot vorming van waterstofbruggen.

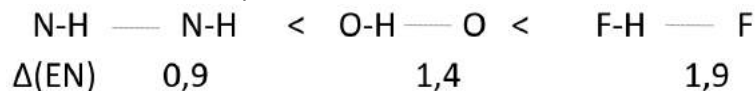


→ Het vrije elektronenpaar van F wordt aangetrokken door de δ^+ van H
→ Elektronenpaar wordt gedeeld



→ Sterker dan dipool-dipool
→ Veel zwakker dan covalente binding

Hoe sterker het dipoolmoment → hoe sterker de waterstofbrug:



Kookpunt van een verbinding wordt bepaald door sterkte H-brug en aantal H-bruggen dat kan gevormd worden.

- ook al is de sterkte van de waterstofbrug van HF groter dan die van H₂O zal het kookpunt van H₂O hoger liggen
⇒ H₂O kan meer H-bruggen vormen (4)

Waterstofbruggen kunnen ook gevormd worden tussen niet gelijke moleculen:



Sterkte: $\pm 5\%$ van covalente binding, soms belangrijk in een welbepaalde molecule wegens groot aantal : DNA, eiwitten

11.3.4 Ion-dipoolinteracties

→ Interactie tussen ion en dipoolmolecule (polaire molecule)

→ hydratatie van ionen in water: zorgt voor oplosbaarheid wegens sterke interacties.

11.4 De vloeibare toestand

Fysische eigenschappen van een vloeistof

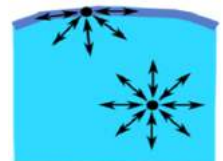
- dichtheid: $\rho_{\text{gas}} \text{ (g.dm}^{-3}\text{)} \ll \rho_{\text{vloeistof}} \approx \rho_{\text{vast}} \text{ (g.cm}^{-3}\text{)}$
- samendrukbaarheid: klein wegens kleine intermoleculaire afstanden
- diffusie: trager dan bij gassen
- viscositeit η = weerstand van een vloeistof om te "vloeien".
 - o lage η : (ethanol, water): vloeien snel
 - o hoge η : (motorolie, siroop): vloeien traag
 - o sterke intermoleculaire krachten → hoge viscositeit
 - o stijgende T → kinetische energie van de deeltjes neemt toe ⇒ verlaagt η

Verbinding	Oppervlakte spanning/ 10^{-3} J.m^{-2}	Viscositeit /mPa.s	binding
Vloeibare stoffen			
Br ₂	40,95	0,94	Londondispersie
Hg	485,5	1,53	Metallische binding
Organische stoffen			
CH ₃ OCH ₃ (46 g/mol)	17	0,22	zwakke dipool-dipool
n-hexaan (86 g/mol)	18	0,30	Londondispersie
Aceton (58 g/mol)	23	0,31	Dipool-dipool
Ethanol (46 g/mol)	22	1,07	H-brug
water			
0°C	75,6	1,79	waterstofbruggen
20°C	72,8	1,00	
60°C	66,2	0,47	
100°C	58,9	0,28	

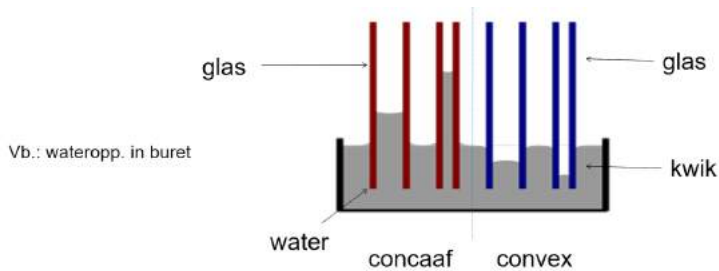
→ hoe hoger de intermoleculaire interacties

→ hoe hoger de viscositeit

- oppervlaktespanning γ : energie nodig om een oppervlak te vergroten met 1 m^2
 - o Normale molecule, in de bulk van de vloeistof, hun netto aantrekking is 0
 - o Molecule aan oppervlak wordt netto naar binnen getrokken
 - hebben een hogere energie dan deze in de bulk van de vloeistof
 - hoe groter het opp. van de vloeistof, hoe hoger de energie die de vloeistof in het totaal zal hebben
 - ⇒ Oppervlak is minimaal (bolvormig), want dan minder energie
 - ⇒ Vergroten van het oppervlak kost energie: oppervlaktespanning
 - o Hoe sterker de intermoleculaire interacties
 - o Hoe hoger de oppervlaktespanning
 - o Hoe hoger de temperatuur
 - o Hoe lager de intermoleculaire interacties
 - o Hoe lager de oppervlaktespanning



- capillariteit : gevolg van verschil tussen sterkte interacties moleculen van de vloeistof onderling (cohesie) en interacties tussen moleculen vloeistof en andere stof (adhesie): opstijgen vloeistof in smalle buis (capillair)



Links: cohesie tussen waterstofmoleculen kleiner dan de adhesie tussen water en glas

rechts: cohesie tussen kwikmoleculen groter dan de adhesie tussen kwik en glas

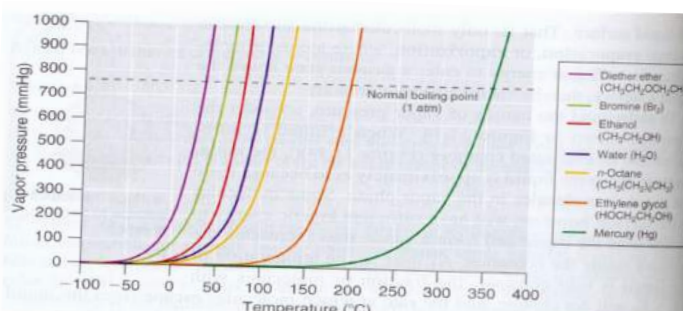
11.5 Dampdruk van een vloeistof

15.5.1 Verdampen

dampdruk of dampspanning van een vloeistof

- = de gasdruk die wordt uitgeoefend bij het overgaan van de vloeistoffase naar de gasfase.

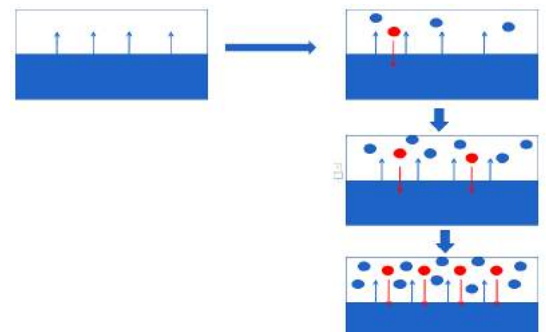
→ in een afgesloten vat (bij een gegeven T) ⇒ evenwichtsdampdruk P_{vap}



P_{vap} bij
 $\neq$ stoffen
 $\neq T$
 ⇒ dampdrukcurven

vragen:

1. Waarom ontstaat er een constante dampdruk boven een vloeistof?
 - Moleculen en vormen damp
 - o enkel als de E_{kin} voldoende groot is
 - Verdampingssnelheid blijft constant
 - o ~ fractie deeltjes die voldoende hoge E_{kin} hebben
 - Condensatiesnelheid
 - o afh. van het aantal deeltjes in de gasfase boven de vloeistof
 - o hoe meer deeltjes in gasfase, hoe hoger de druk boven de vloeistof, hoe sneller de condensatiesnelheid



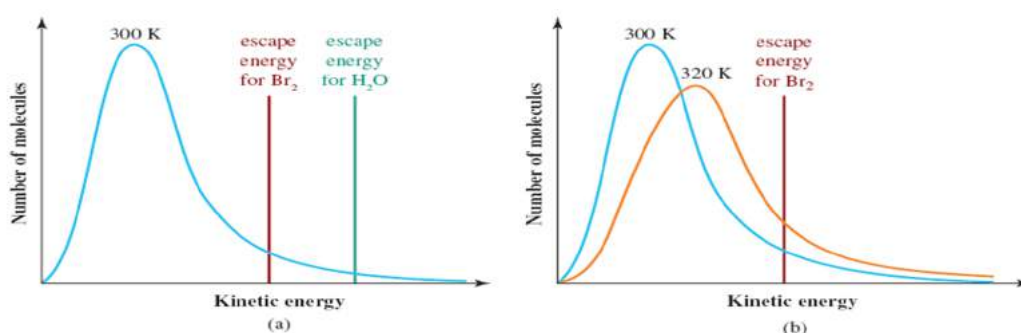
⇒ Evenwicht als verdampingssnelheid = condensatie snelheid

⇒ Dampdruk blijft gelijk (evenwichtsdampdruk)

⇒ Dynamisch evenwicht

2. Waarom het aantal moleculen dat voldoende energie heeft om te ontsnappen afhangt van temperatuur en van de sterkte van de intermoleculaire krachten (OAK)?

De moleculen aan het oppervlak van de vloeistof worden onder invloed van de onderlinge aantrekkingskrachten naar het binnenste van de vloeistof getrokken. Opdat een molecule het oppervlak van de vloeistoffase zou kunnen verlaten en in de gasfase kan overgaan, moet zij beschikken over een minimale kinetische energie $E_{\text{kin/min}}$, om deze OAK's te overwinnen.



→ verdeeld volgens een Maxwell-Boltzmann distributie

⇒ OAK's van H₂O veel groter dan bij Br₂ ⇒ $E_{\text{kin/min}}$ groter bij H₂O ⇒ bij 300K veel meer Br₂ dat kan ontsnappen dan H₂O	⇒ Bij hogere temperatuur, hebben er meer moleculen de $E_{\text{kin/min}}$ en zullen er dus meer Br₂ kunnen ontsnappen (Bij hogere temperatuur, lagere OAK's)
--	--

opmerkingen

- De dampdruklijn eindigen in het **kritisch punt**. Boven deze T en P is er geen onderscheid meer tussen de vloeistof- en dampfase: de stof wordt superkritisch
- De energie nodig om 1 mol van de stof te verdampen bij een evenwichtstemperatuur noemt men de molaire verdampingsenthalpie $\Delta_{\text{verd}}H$
 - 0 bij het kritisch punt
 - omgekeerde proces is $\Delta_{\text{cond}}H = -\Delta_{\text{verd}}H$
- De dampdruk is onafhankelijk van de hoeveelheid vloeistof in de container
- Bij verdamping in een open systeem bij constante T zal er verdamping plaatsgrijpen tot een dynamisch evenwicht is ingesteld waarbij de partiële druk van de waterdamp in de lucht gelijk is aan de dampdruk van water bij die temperatuur

in formules:

→ aanvullen uit dia's (42-44) + filmpje "dampdruk boven een vloeistof" vanaf 8:40

$$V_{\text{verd}} = V_{\text{cond}}$$
$$C_1 \cdot e^{-\frac{N_A (KE_{\text{min}})}{RT}} = C_2 \cdot P$$

11.5.2 Koken

Dampdruk boven de vloeistof neemt toe met de temperatuur. Bij een bepaalde T wordt deze evenwichtsdampdruk = uitwendige druk

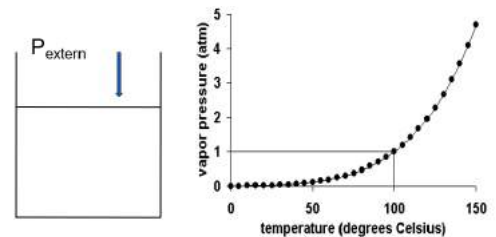
⇒ Dampbellen in de vloeistof: KOKEN

T waarbij evenwichtsdampdruk = uitwendige druk = 1 atm = normaal kookpunt

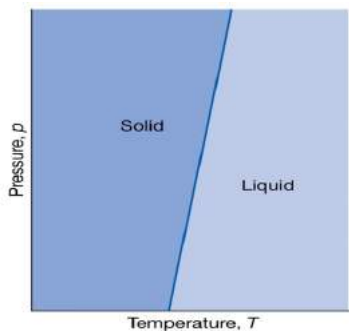
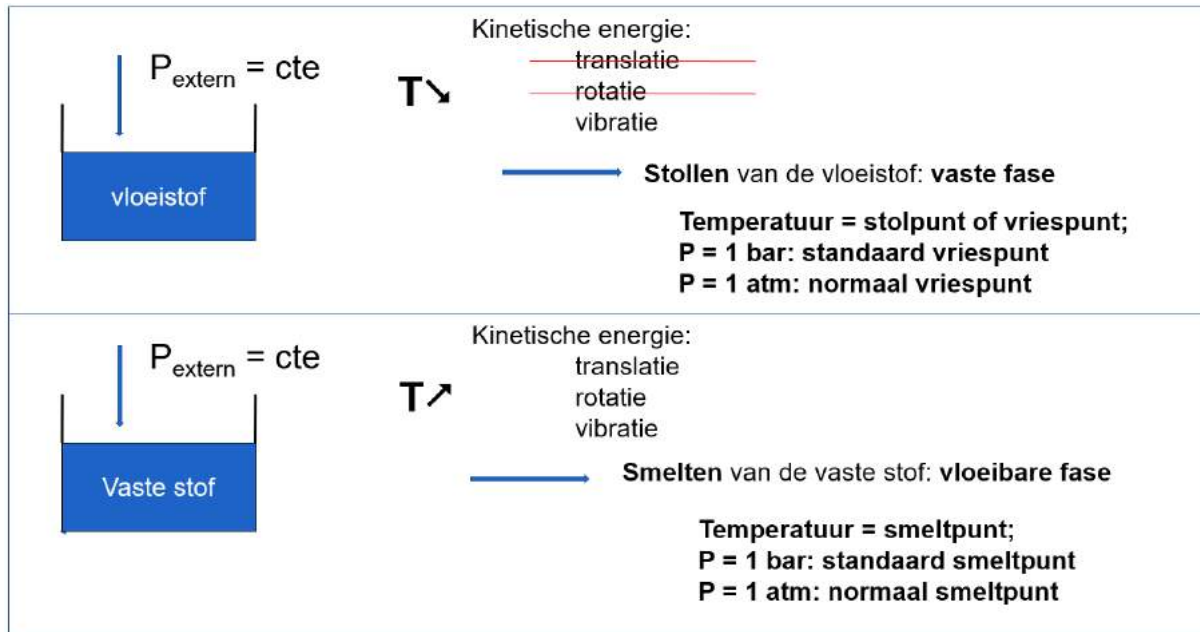
T waarbij evenwichtsdampdruk = uitwendige druk = 1 bar = standaard kookpunt

- Dampdruk neemt toe met toenemende temperatuur
- Kookpunt neemt toe met toenemende druk!
- !!! Kookpunt van een vloeistof is afhankelijk van de uitwendige druk

(Reden waarom we als we water zouden koken op de Mt Everest het kookpunt 72°C is)



11.6 De vaste toestand



doorgaans helling van de smeltlijn > 0

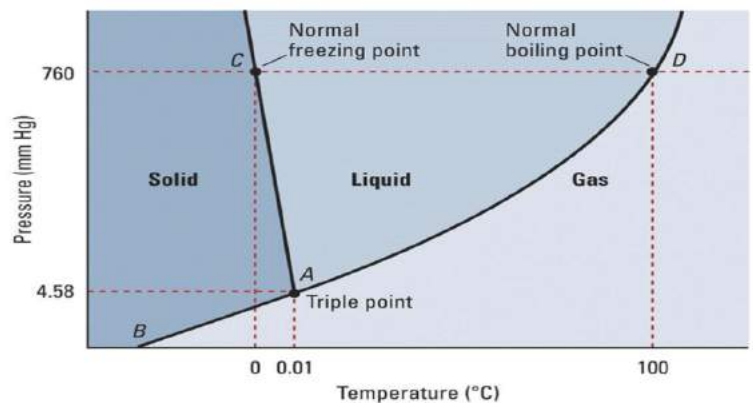
- hogere P
- deeltjes dichter
- sterkere intermoleculaire krachten
- hogere T nodig om deze te overwinnen.

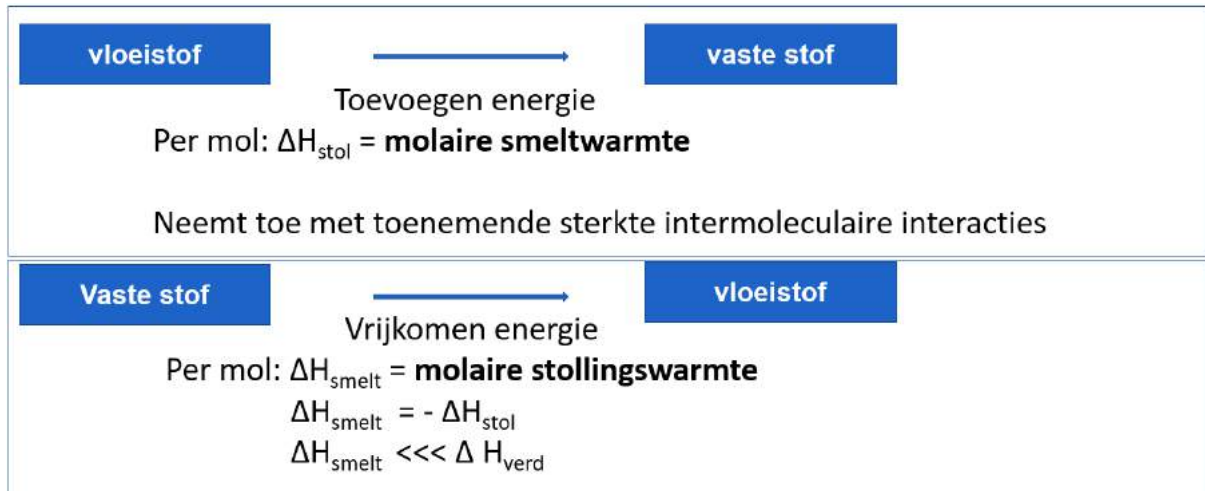
uitzondering: water

- smeltpunt neemt af met druk
- water smelt bij lagere T als druk hoger is!

⇒ schaatsen op ijs

- lokale druk (door gewicht)
- waterlaagje
- water kan onderling bewegen





(smelt en stollingswarmte omdraaien)

hoge smeltenthalpie

→ sterke intermoleculaire interacties

→ smeltpunt neemt toe

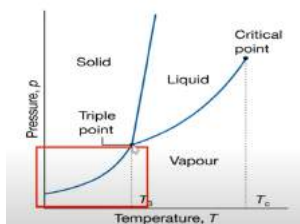
Onderkoelde vloeistof:

= Onstabiele toestand waarbij de vloeistof vloeibaar is beneden stolpunt bij een bepaalde druk.

→ Gaat over in stabiele toestand door verstoring in de vloeistof: roeren, kristal, ..

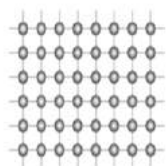
Sublimatie

Moleculen aan het oppervlak met voldoende kinetische energie kunnen de intermoleculaire aantrekking in het kristal overwinnen en gaan in dampfase



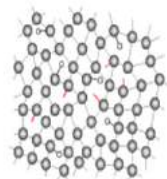
- verband tussen dampdruk en temperatuur: sublimatielijijn
- sublimeren $\Rightarrow$ enthalpieverandering
→ sublimatie-enthalpie > 0

11.7 Eigenschappen van de vaste toestand



Kristallijne vaste stof

→ regelmatig terugkerende 3D structuur (kristalrooster)



Amorfe vaste stof

→ geen regelmaat in onderlinge positie

11.7.1 Kristallijne stoffen

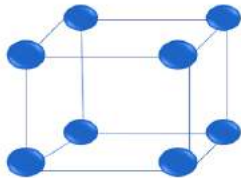
Eenheidscel:

Herhalende patronen van de componenten in drie dimensies: volledige structuur kan worden voorgesteld door middel van de kleinste zich steeds herhalende eenheid

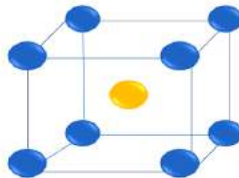
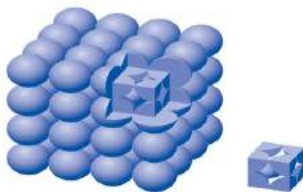
De kubische eenheidscel.

$$a = b = c$$

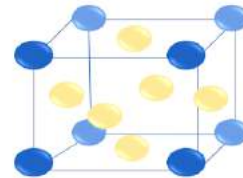
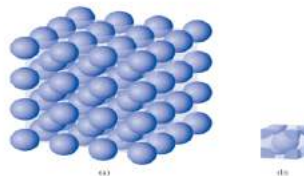
$$\alpha = \beta = \gamma$$



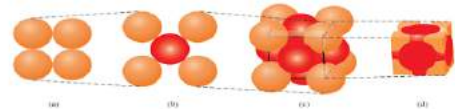
Eenvoudig kubisch
1 atoom per eenheidscel



Cel gecentreerd kubisch
2 atomen per eenheidscel
(body-centered cubic bcc)



Vlakken gecentreerd
kubisch
4 atomen per eenheidscel
(face-centered cubic fcc)



- elk atoom behoort tot $\frac{1}{8}$ tot de eenheidscel (behoren ook tot 7 andere kubussen) - 8 hoekpunten - $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ atoom	- $8 \cdot \frac{1}{8}$ - + 1 - = 2 atomen	- $8 \cdot \frac{1}{8}$ - $6 \cdot \frac{1}{2}$ (want ze behoren ook tot de helft bij een andere kubus) - = 4 atomen
---	---	--

vb. NaCl

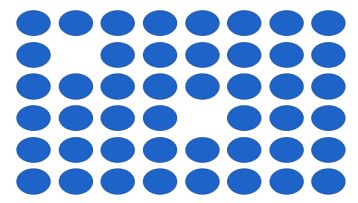
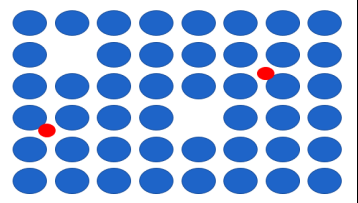
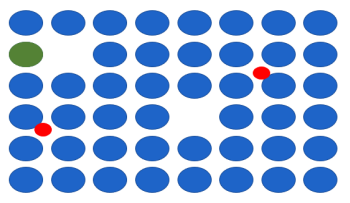
→ Cl⁻: - elk hoekpunt: $8 \cdot \frac{1}{8}$ - elk vlak $6 \cdot \frac{1}{2}$ - = 4 Cl⁻-ionen	→ Na⁺ op elke ribbe: $12 \cdot \frac{1}{4}$ - in het centrum: 1 - = 4 Na⁺-ionen
--	--

⇒ Formule eenheid: NaCl

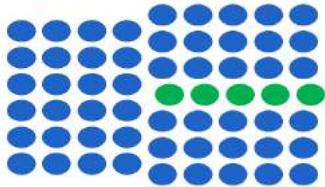
Defecten

roosterdefecten

- puntdefecten: beperken tot een roosterpunt

		
vacatures: er ontbreekt een atoom op een roosterpunt	interstitiëlen: deeltjes tussen de normale roosterpunten	substituties: vervanging van de normale atomen

- lijnfecten: lijn van roosterpunten



- vlakdefecten: ipv lijn er een volledig vlak tussen

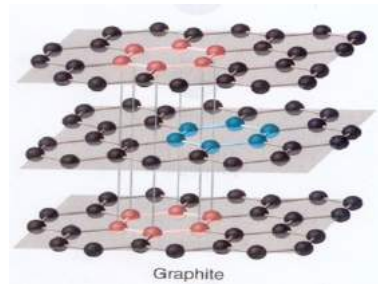
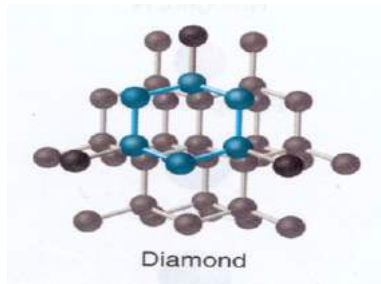
Kristaltype	Deeltjes	OAK's	Eigenschappen	Voorbeeld
Atomair	atomen (niet-metaal)	londonkrachten	zeer laag smeltpunt, kookpunt en $\Delta_{\text{verd}}H$	Kr(v)
Ionair	ionen (+ en -)	elektrostatische attractie	hard, broos, hoog smeltpunt, geen elektrische geleiding in vaste fase, wel in smelt	NaCl, CaCl ₂ , KNO ₃
Moleculair	apolaire moleculen	londonkrachten	laag smeltpunt en kookpunt, zacht, geen elektrische geleiding	CH ₄ , I ₂ , N ₂ , naftaleen
	polaire moleculen	londonkrachten, H-brug, dipool-dipool	laag smeltpunt, lage elektrische geleiding	H ₂ O, suiker, cholesterol
Netwerk	atomen (niet-metaal)	covalente binding	zeer hard, zeer hoog smeltpunt, lage elektrische geleiding	C(diamant), SiO ₂ , SiC
Metallisch	atomen (metaal)	metaalbinding	zacht tot hard, laag tot hoog smeltpunt, plooibaar, rekbaar, goede thermische en elektrische geleiding	Na, Sn, Pb, Au, Ag, Cu, Fe

Tabel 11.10 – Soorten en eigenschappen van kristallijne stoffen

11.7.2 Amorfe vaste stoffen (glasachtige verbindingen)

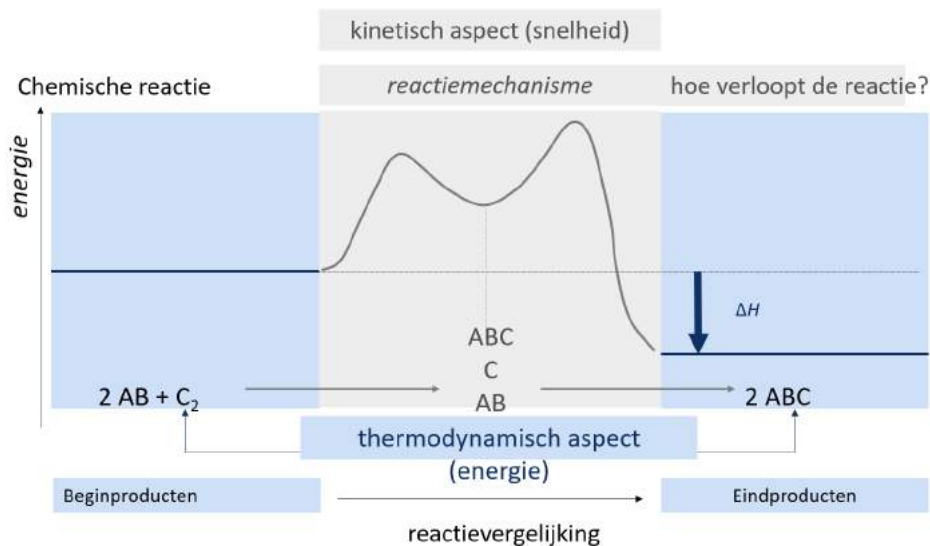
- Geen regelmatige rangschikking van deeltjes in een kristalrooster
- Door smelten van een stof en dan snelle afkoeling krijgen deeltjes niet plaats om energetisch meest gunstige positie in te nemen.
- Geen scherp smeltpunt: wegens de onregelmatige afstanden tussen de samenstellende deeltjes zijn er verschillende energieën nodig om de interacties te doorbreken: leidt tot smeltpunt dat niet duidelijk is

11.7.3 Allotrope vormen van koolstof



Fullerenen: kooistructuren met vergelijkbare vorm maar verschillend aantal C-atomen

H12: CHEMISCHE KINETIEK

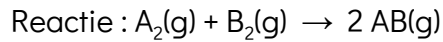


De reactiesnelheid wordt bepaald door het aantal effectieve botsingen / tijd- en volume-eenheid

Dit aantal wordt beïnvloed door:

- Concentratie reagentia
- Fysische toestand $g > vl > v$
- Temperatuur
- Aanwezigheid van een katalysator

12.1 Reactiesnelheid

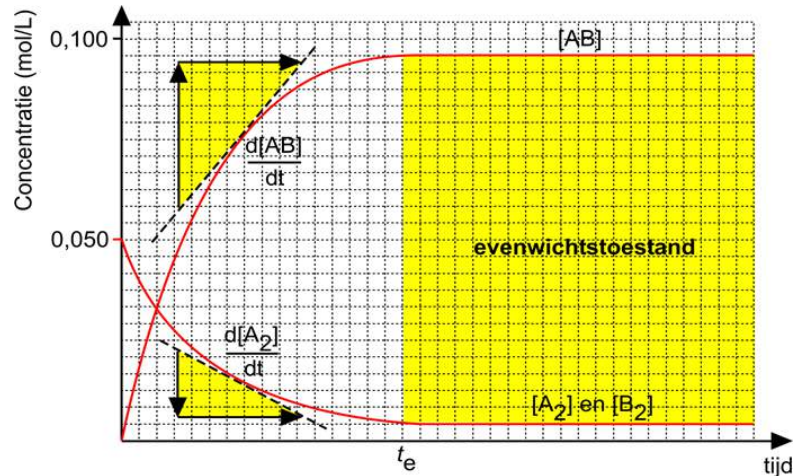


Stel dat we op een tijdstip $t = 0$ in een vat brengen :

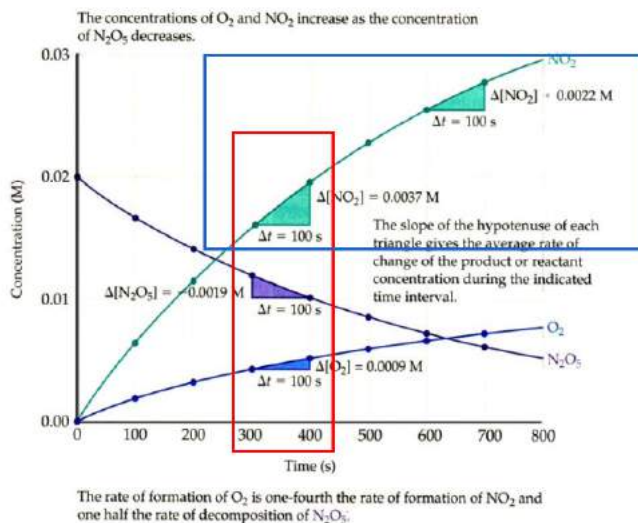
- $[AB] = 0,00 \text{ mol.L}^{-1}$
- $[A_2] = 0,05 \text{ mol.L}^{-1}$
- $[B_2] = 0,05 \text{ mol.L}^{-1}$

Met toenemende tijd :

- $[AB]$ stijgt
- $[A_2]$ en $[B_2]$ nemen af tot een eindtoestand bereikt is



- producten die gevormd worden: positieve helling
- producten die verdwijnen: negatieve helling
- absolute waarden evenredig met met het aantal mol dat reageert in de vergelijking

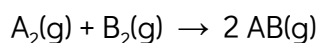


Gemiddelde snelheid
 $= \Delta \text{conc} / \Delta t$
 → afhankelijk van reactiepartner

gemiddelde snelheid
 $= \text{afh. van de tijd}$
 $\Rightarrow$ reactiesnelheid is niet (altijd) constant

gemiddelde snelheid
 $= \text{helling van de schuine zijde van driehoek, gedefinieerd door } \Delta \text{ conc en } \Delta t$

gemiddelde snelheid
 $= \text{helling van de schuine zijde van driehoek, gedefinieerd door } \Delta \text{ conc en } \Delta t$



$$v = \frac{-d[A_2]}{dt} = \frac{-d[B_2]}{dt} = \frac{+d[AB]}{2 dt} \text{ of algemeen } \frac{\pm d[X]}{a dt}$$

→ a = voorgetal in de reactievergelijking

12.2 Invloed van de concentratie op de reactiesnelheid

reactiesnelheidsvergelijking: $v = k [A_2]^x \cdot [B_2]^y \dots$

- x en y zijn de **partiële ordes** van de reagentia
 - o niet af te leiden uit reactievergelijking
 - o wel experimenteel te bepalen (vb. p 12.4)
- k = **(reactie)snelheidsconstante** (afhankelijk van de temperatuur)
 - o !!! eenheid afhankelijk van de globale orde
 - o vb:

$$k? \quad v = k \cdot [\text{NO}]^2 \cdot [\text{O}_2]^1$$

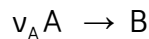
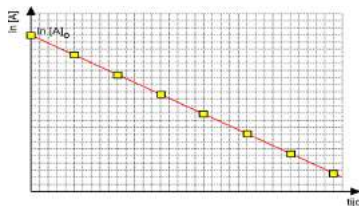
$$k = \frac{v}{[\text{NO}]^2 [\text{O}_2]} = \frac{7 \cdot 10^{-6} \text{ mol L}^{-1} \text{ s}^{-1}}{(10^{-3} \text{ mol L}^{-1})^2 \cdot 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}} = 7 \cdot 10^3 \frac{\text{L}^2}{\text{mol}^2 \text{ s}^{-1}}$$

- **globale orde van de reactie** = x + y +
 - o globale orde = 0 $\Rightarrow$ reactiesnelheid onafhankelijk van de concentraties

12.3 De verandering van de concentratie in functie van de tijd

$\rightarrow$!!! tabellenboekje

Eerste orde in 1 reagens



$$\ln [A] = \ln [A]_0 - v_A k \cdot t$$

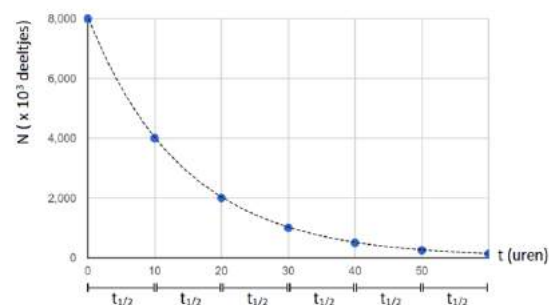
$\rightarrow$ Lineaire afname van $\ln [A]$ in functie van de tijd

Halveringstijd $t_{1/2}$

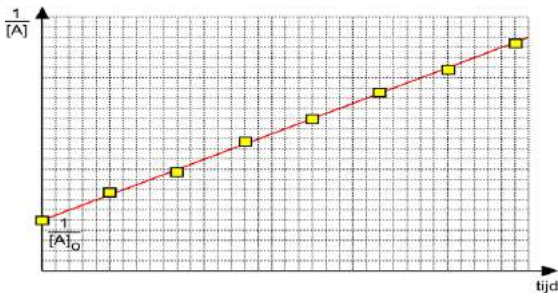
- = tijd nodig opdat de concentratie op de helft van de oorspronkelijke concentratie gevallen is, d.w.z.
- onafhankelijk van de beginconcentratie

$$t_{1/2} = \frac{0,693}{v_A k}$$

In het onderstaande (N,t)-diagram zien we het aantal radioactieve deeltjes in een bron (N) uitgezet tegen de tijd (t). In dit geval zien we dat het aantal radioactieve kerndeeltjes elke 10 uur halveert. Voor deze bron geldt dus een halveringstijd van 10 uur.



Tweede orde in 1 reagens



$$v = \frac{-d[A]}{v \, dt} = k [A]^2$$

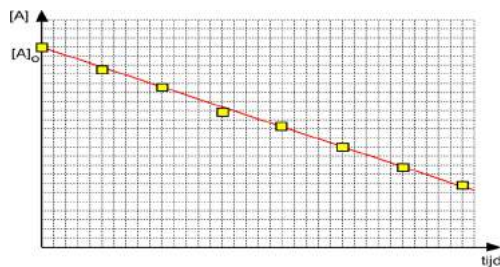
$$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + v_A k \cdot t$$

→ $1/[A]$ neemt lineair toe in functie van de tijd

$t_{1/2}$ omgekeerd evenredig met de beginconcentratie: neemt toe in functie van de tijd

$$t_{1/2} = \frac{1}{v_A k \cdot [A]_0}$$

Nulde orde reactie in één reagens



$$[A] = [A]_0 - v_A k \cdot t$$

→ lineair verband tussen $[A]$ en de tijd

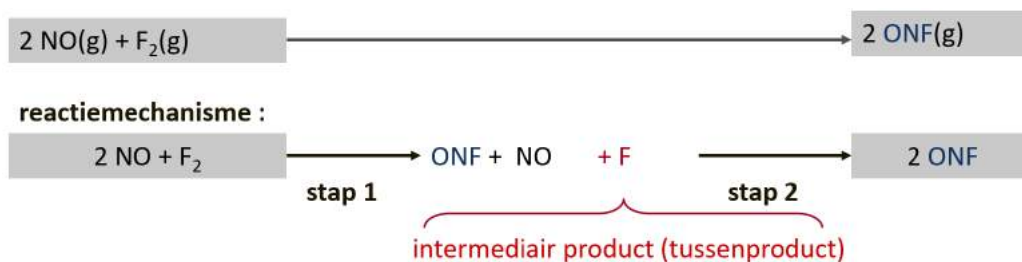
$t_{1/2}$ evenredig met de beginconcentratie

$$t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2 v_A k}$$

12.4 Moleculaire verklaring van de reactiesnelheid

reactiemechanisme: opeenvolging van de verschillende stappen in een complexe reactie

- **intermediaire of tussenproduct:** wordt gevormd in 1 stap en verdwijnt in de volgende stap zodat het in de globale reactie niet voorkomt.
- **éénstapsreacties of elementaire reacties:** gaan wel in 1 stap door (geen tussenproduct)



A. Botsingstheorie

→ reactiesnelheid wordt verklaard uitgaande van botsingen tussen moleculen

Moleculen kunnen reageren als ze botsen

→ reactiesnelheid $\sim$ aantal botsingen (Z)

$$v \sim Z$$

!! Niet elke botsing is effectief

1. Ze botsen niet in de “geschikte” richting

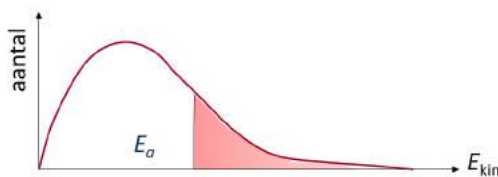
$$v \sim p$$

- reactiesnelheid $\sim$ waarschijnlijkheid voor geschikte richting bij botsing
- = probabiliteitsfactor p

2. De kinetische energie van de moleculen is te klein

$$v \sim f$$

- reactiesnelheid $\sim$ fractie van de moleculen die effectief botst (f)



te weinig E_{kin}

→ ze botsen maar veranderen niet

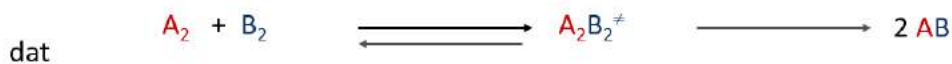
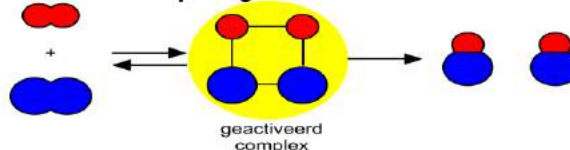
→ = elastische botsing

Vandaar dat de temperatuur effect heeft op de reactiesnelheid, want andere temperatuur, andere Maxwell Boltzmann-verdelingscurve

$$\Rightarrow v = p \cdot f \cdot Z$$

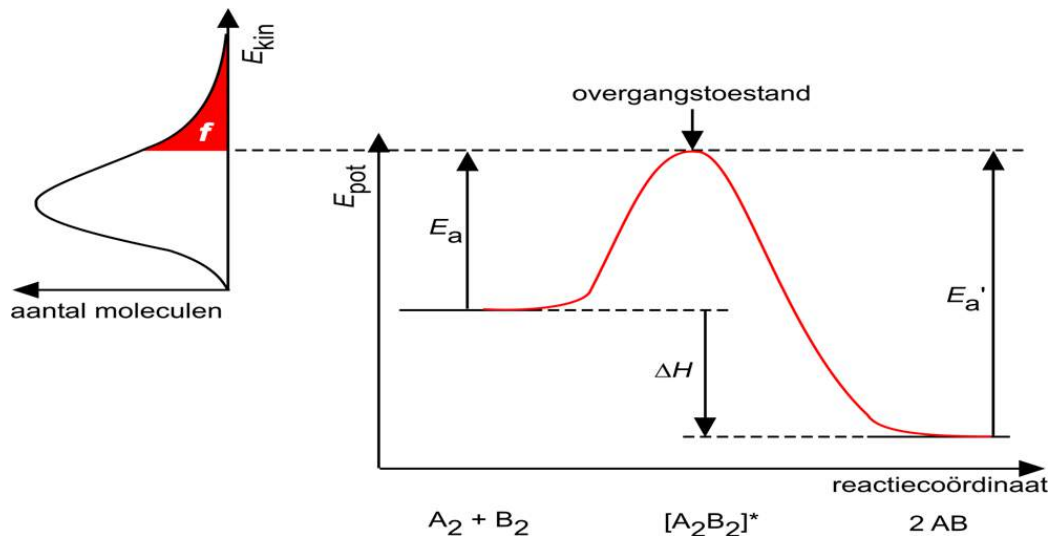
B. De theorie van de transitietoestand (theorie van het geactiveerd complex)

Bij botsing wordt een **geactiveerd complex** gevormd :



- ofwel kan terugvallen in A_2 en B_2 ←

- ofwel kan uiteenvallen in $\rightarrow 2 AB$

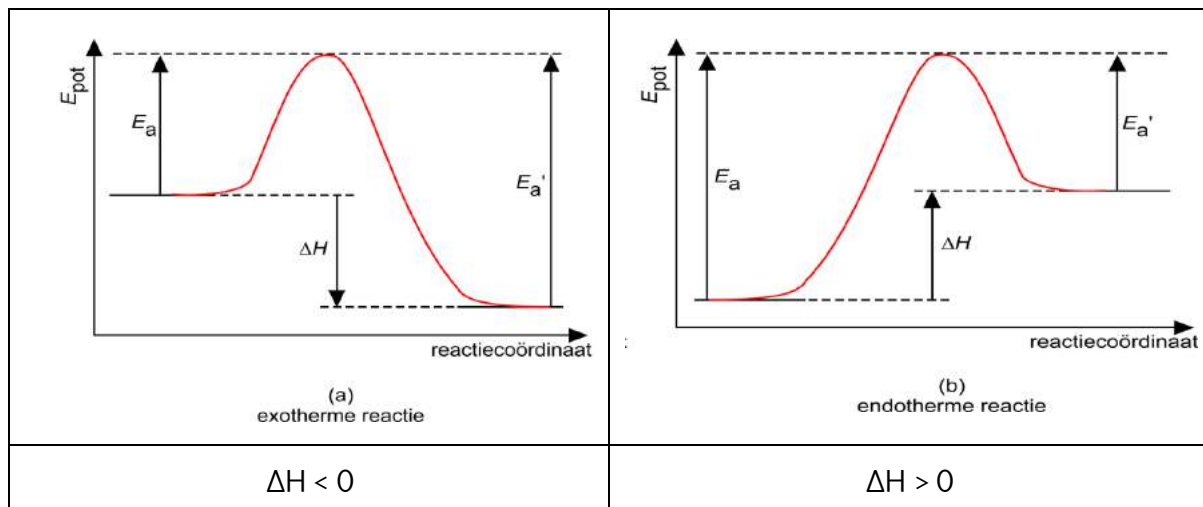


- Complex bevindt zich dus in een toestand van relatief hoge potentiële energie
- Alleen deze moleculen die een E_{kin} hebben die groter is dan de activeringsenergie kunnen de transitietoestand bereiken

A_2B_2 kan

- terugvallen naar oorspronkelijke toestand (A_2 en B_2)
→ extra E_{pot} wordt terug omgezet in E_{kin}
- uitenvallenn in AB-moleculen
→ E_{pot} van het systeem neemt af met E_a'

⇒ Enthalpieverandering van de reactie: $\Delta H = E_a - E_a'$



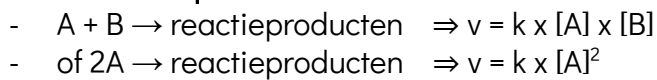
12.5 Reactiesnelheidvergelijkingen voor éénstapsreacties

De moleculariteit van een éénstapsreactie is gelijk aan het aantal deeltjes dat aan deze reactie deelneemt

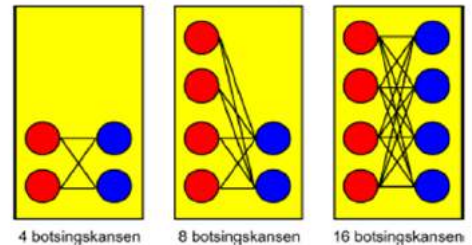
Monomoleculair of unimoleculaire stap



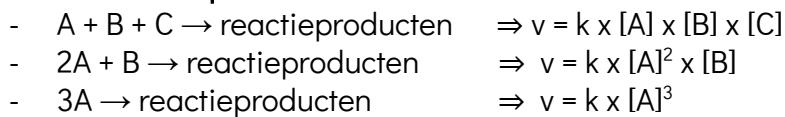
Bimoleculaire stap



→ A of B verdubbelen $\Rightarrow 2 \times$ zoveel botsingen
 → A en B verdubbelen $\Rightarrow 4 \times$ zoveel botsingen



Termoleculaire stap



$\Rightarrow$ eenstapsreacties: de orde gelijk aan de moleculariteit

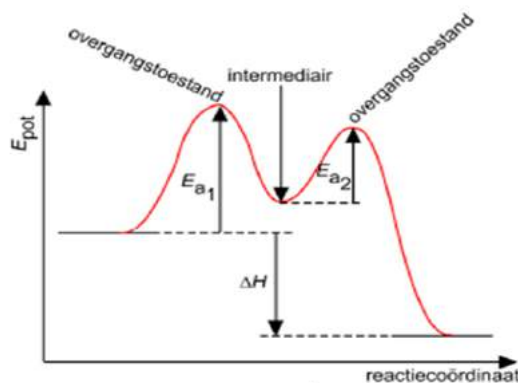
12.6 Reactiemechanismen

complexe reacties: opeenvolging van eenstapsreacties

→ in veel gevallen is 1 stap trager dan de andere

→ men noemt dit de **snelheidsbepalende stap (SBS)**

A. Meerstapsreactie waarbij de eerste stap snelheidsbepalend is



k_{exp} (= experimenteel bepaalde snelheidscte)
 $= k_1 \rightarrow$ hoogste activeringsenergie

B. Meerstapsreactie waarbij de eerste stap NET snelheidsbepalend is

→ veel oefeningen maken op stationaire toestand (steady state!!)

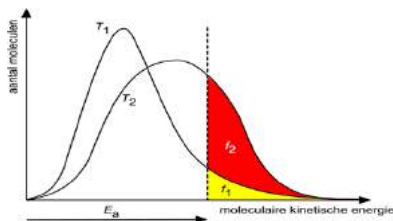
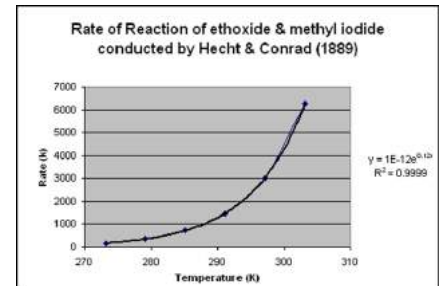
12.7 Invloed van de temperatuur op de reactiesnelheid

Reactiesnelheidsvergelijking: $v = k \cdot [A]^x \cdot [B]^y$

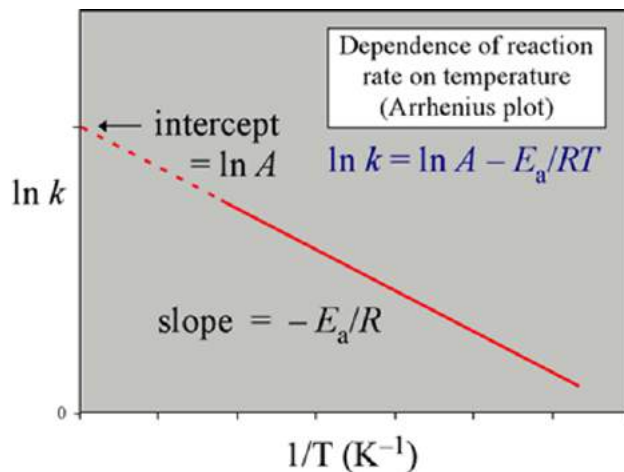
→ temperatuursafhankelijkheid zit in snelheidsconstante k

Arrheniusvergelijking: $k = A \cdot e^{-E_a / RT}$

- A : pre-exponentiële factor
- E_a : activeringsenergie
- $A \sim Z$ en p
- $e^{-E_a / RT} \sim$ fractie (deel) van de moleculen met een $E_{kin} > E_a$



→ bij een hogere temperatuur is het deel dat voldoende E_{kin} heeft groter.



→ Bepalen van E_a en A mogelijk

12.7 Invloed van de katalysator op de reactiesnelheid

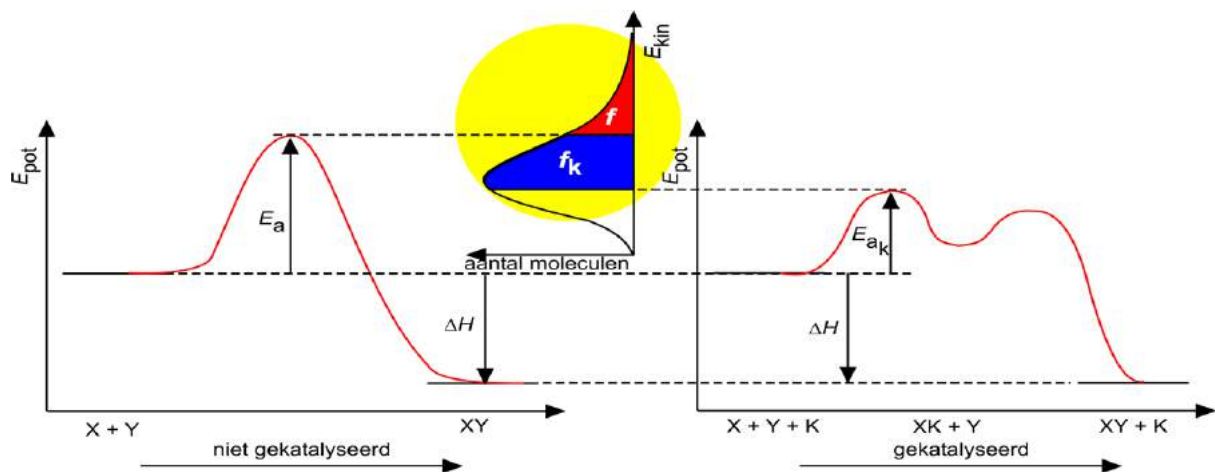
katalysator

- verhoogt de reactiesnelheid
- wordt achteraf onveranderd teruggevonden (wordt niet verbruikt)

⇔ Inhibitor: verlaagt de reactiesnelheid)

Werking? een katalysator laat de reactie doorgaan volgens

- een ander mechanisme dat gekenmerkt wordt door een lagere activeringsenergie (E_a)
- $\Rightarrow$ de fractie van de moleculen ($f = e^{-E_a/RT}$) die efficiënt botsen d.w.z. deze met $E_{kin} > E_a$ groter wordt

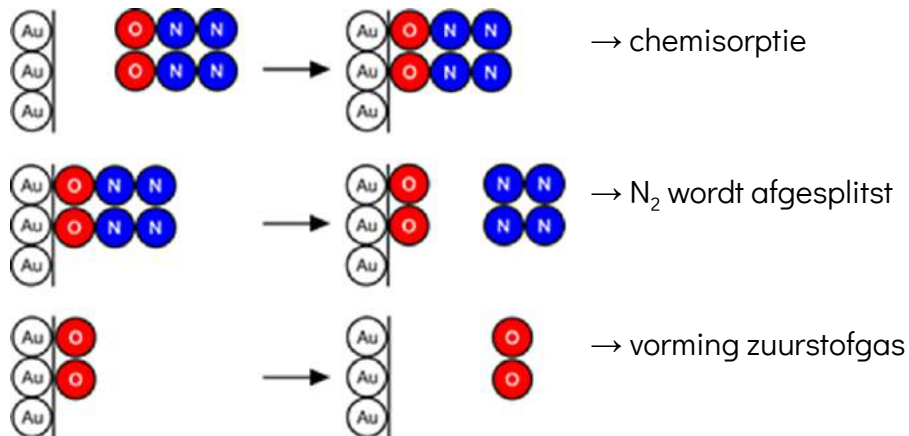


Zonder katalysator :
 $X + Y \rightarrow XY$

Met katalysator :
 $X + Y + K \rightarrow XK + Y \rightarrow XY + K$

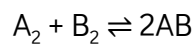
- De reactie-enthalpie ΔH is onafhankelijk van de aanwezigheid van de katalysator
- De katalysator op beïnvloed op dezelfde manier de omgekeerde reactie
- Homogene katalyse: katalysator en reagentia in dezelfde fase
- Heterogene katalyse: katalysator en reagentia in verschillende fasen

Voorbeeld heterogene katalyse:
ontbinding van N_2O met goud als katalysator



H13 CHEMISCH EVENWICHT

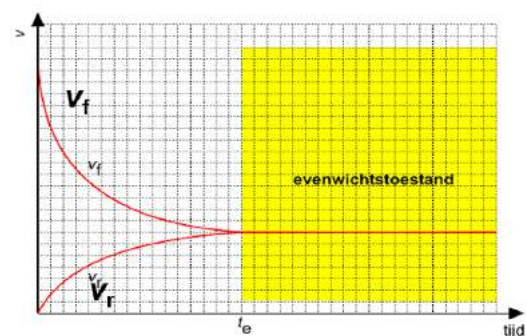
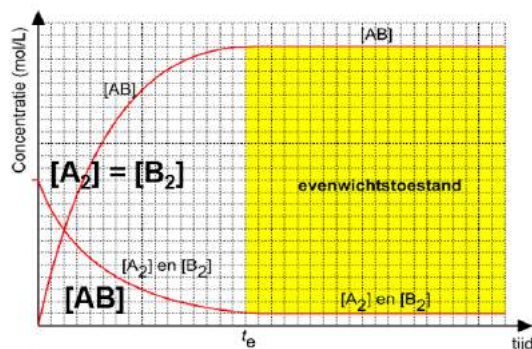
13.1 De evenwichtstoestand



De evenwichtstoestand wordt bereikt wanneer de concentraties van A_2 , B_2 en AB niet meer veranderen. Op dat moment is de snelheid waarmee AB gevormd wordt (V_f) gelijk aan de snelheid waarmee AB terug uiteen valt (V_r).

Dynamisch evenwichtstoestand vanaf $t_e \Rightarrow V_f = V_r$

- Dynamisch evenwicht want het is niet dat er geen omzettingen meer gebeuren, maar netto zal er in het reactievat niets meer veranderen



13.2 De evenwichtsconstante

Wet van Guldberg en Waage (1864):

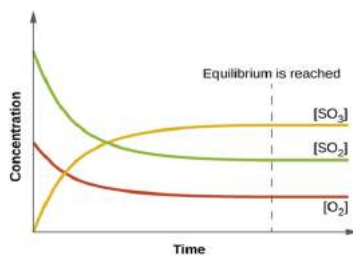
Een chemisch proces in een gesloten systeem bij een bepaalde temperatuur bereikt steeds een toestand waarbij een welbepaalde verhouding van de concentraties aan reagentia en producten een constante waarde heeft

Reactie: $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$

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

K = de evenwichtsconstante

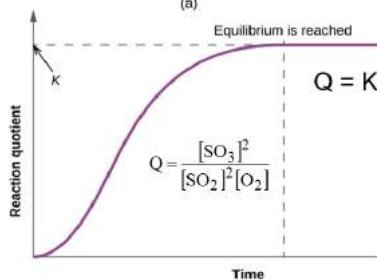
- temperatuursafhankelijk
- geen eenheid



vb. $2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3$

Q = de concentratiequotient

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



$\Rightarrow$ pas vanaf t_e is deze gelijk aan K

- K klein ($K \ll 1$) $\Rightarrow$ weinig reactieproducten
- K groot ($K \gg 1$) $\Rightarrow$ weinig reagende producten die overblijven
- intermediaire K $\Rightarrow$ beduidende hoeveelheden reagerende stoffen én reactieproducten samen aanwezig

opmerkingen

Gekoppelde evenwichten



is som van twee opeenvolgende reacties:



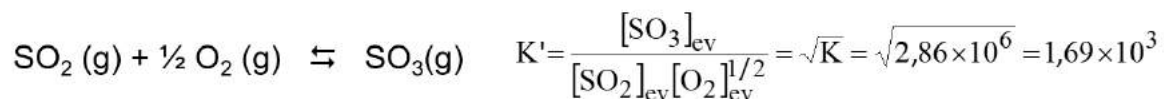
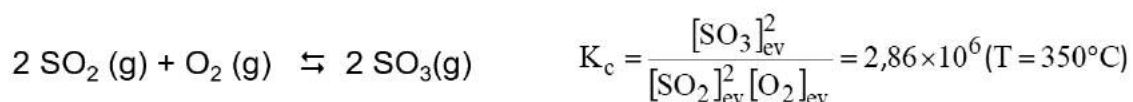
Richting van de reactie



Omgekeerde reacties

$$K' = K^{-1}$$

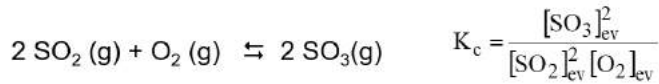
Stoichiometrie



Het is noodzakelijk om, bij een bepaalde waarde van K, de voorgetallen in de reactievergelijking te weten!

→ wordt een reactievergelijking met een coëfficiënt vermenigvuldigd, dan wordt K tot de macht van die coëfficiënt verheven

voor een evenwichtsreactie in de gasfase wordt de evenwichtsvoorwaarde bij voorkeur in drukken (bar) weergegeven $\Rightarrow$ evenwichtsconstante K_p



$$K_p = \frac{P_{\text{SO}_3, \text{ev}}^2}{P_{\text{SO}_2, \text{ev}}^2 \times P_{\text{O}_2, \text{ev}}} = 0,41 \quad (1100\text{K}; \mathbf{P \text{ in bar}})$$

Verband: via de algemene gaswet:

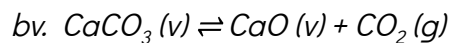
$$K_p = \left(\frac{P_{\text{SO}_3}^2}{P_{\text{SO}_2}^2 P_{\text{O}_2}} \right)_{\text{ev}} = \frac{\left(\frac{n}{V} \right)_{\text{SO}_3}^2 (RT)^2}{\left(\frac{n}{V} \right)_{\text{SO}_2}^2 (RT)^2 \left(\frac{n}{V} \right)_{\text{O}_2} (RT)} = K_c (RT)^{-1} \quad \text{Gekoppeld aan stoichiometrie}$$

$$\Rightarrow K_p = K_c \times (R \times T)^{-1}$$

!!! Je kan K_p enkel berekenen met gassen

Heterogene evenwichten

$\rightarrow$ verschillende partners van de reactie komen in verschillende fasen voor



$$K_c = \frac{[\text{CaO}]_{\text{ev}} [\text{CO}_2]_{\text{ev}}}{[\text{CaCO}_3]_{\text{ev}}} = [\text{CO}_2]_{\text{ev}}$$

$$K_p = (P_{\text{CO}_2})_{\text{ev}}$$

!!!!!! Zuivere vaste stoffen en vloeistoffen hebben waarde "1" in de evenwichtsconstante

Bij homogene evenwichten (bv. allemaal vloeistof) kan je K_c wel berekenen en zijn de vloeistoffen en vaste stoffen niet gelijk aan 1

13.3 De richting van een evenwichtsreactie



Richting van de reactie kan je voorspellen door vergelijking Q en $K (= Q_{\text{ev}})$

$$Q = \frac{[\text{C}]^c [\text{D}]^d}{[\text{A}]^a [\text{B}]^b} \quad Q_{\text{actueel}} = \frac{[\text{C}]^c [\text{D}]^d}{[\text{A}]^a [\text{B}]^b} > K \quad \text{Producten} \rightleftharpoons \text{reagentia}$$

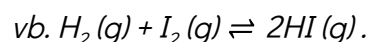
$$Q_{\text{actueel}} = \frac{[\text{C}]^c [\text{D}]^d}{[\text{A}]^a [\text{B}]^b} < K \quad \text{Reagentia} \rightleftharpoons \text{producten}$$

$$Q_{\text{actueel}} = \frac{[\text{C}]_{\text{ev}}^c [\text{D}]_{\text{ev}}^d}{[\text{A}]_{\text{ev}}^a [\text{B}]_{\text{ev}}^b} = K \quad \text{Dynamisch evenwicht is bereikt}$$

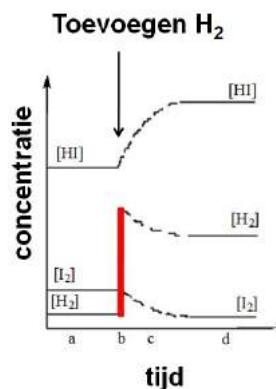
13.4 Het principe van Le Chatelier

13.4.1 concentratieveranderingen

Een systeem in evenwicht waarop van buitenaf een invloed wordt uitgeoefend, bereikt opnieuw een evenwicht door reactie zodanig dat die invloed wordt verminderd.



- H_2 toegevoegd $\Rightarrow$ evenwicht verstoord
- H_2 moet weer afnemen
 - o Hoeveelheden H_2 , I_2 nemen af
 - o Hoeveelheid HI neemt toe



13.4.2 Druk- en volumeveranderingen

Drukveranderingen

in een gesloten vat met constant volume kunnen optreden door:

1. verandering van de concentratie van gasvormige componenten (zie 13.4.1)
2. toevoegingen van een inert gas (E) dat niet aan de reactie deelneemt
 $\Rightarrow$ geen invloed: partiële druk van elke reactiecomponent blijft constant

Volumeverandering

$$P_{\text{totaal}} = (n_{\text{totaal}} \cdot R \cdot T) / V$$

$\Rightarrow$ verandering van V leidt tot verandering van P

- $V \downarrow$: evenwicht verschuift zodat het aantal mol gas in het vat afneemt
- $V \uparrow$: evenwicht verschuift zodat het aantal mol gas in het vat toeneemt

!!!! Als er evenveel mol reagerende producten (g) als reactieproducten (g) zijn, dan heeft een volume-verandering GEEN effect hebben op het evenwicht

- Afname van het volume ($\equiv$ toename van de druk) leidt tot een verschuiving van het evenwicht waarbij het aantal gasmoleculen afneemt
- Toename van het volume ($\equiv$ afname van de druk) leidt tot een verschuiving van het evenwicht waarbij het aantal gasmoleculen toeneemt
- blijft in een reactie het aantal gasmoleculen constant, dan hebben druk en volume geen invloed op de ligging van het chemisch evenwicht

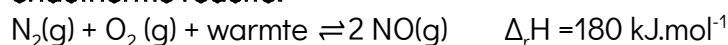
13.4.3 Invloed van de temperatuur

exotherme reactie:



- Toename T = toevoegen warmte: evenwicht naar links
- Afname T = afvoeren warmte: evenwicht naar rechts

endotherme reactie:



- Toename T = toevoegen warmte: evenwicht naar rechts
- Afname T = afvoeren warmte: evenwicht naar links

→ Exotherme reactie: K daalt met T ↑

→ Endotherme reactie: K stijgt met T ↑

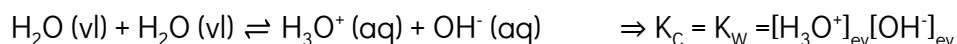
13.4.4 Invloed van een katalysator

Aangezien een katalysator zowel de heenreactie als de terugreactie in dezelfde mate versneld door een verlaging van de activeringsenergie, heeft deze geen invloed op de ligging van het evenwicht, alleen de snelheid waarmee het evenwicht wordt bereikt neemt toe.

13.5 Toepassingen van chemisch evenwicht in waterige oplossing

→ OEFENINGEN!!!!

15.5.1 Eigendissociatie van water



Bij 25°C: $[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] = 1,00 \times 10^{-7} \text{ mol/L} \quad \Rightarrow K_w = 1,00 \times 10^{-14}$ (=ionenproduct van water)

- Aan deze voorwaarde is altijd voldaan, ongeacht de samenstelling van de oplossing
- Toevoegen van zuur: $[\text{H}^+] \uparrow \Rightarrow [\text{OH}^-] \downarrow$
- Toevoegen van base: $[\text{OH}^-] \uparrow \Rightarrow [\text{H}^+] \downarrow$
- K_w is afhankelijk van de temperatuur:

T / °C	K _w	pK _w	pH water
0	0,12.10 ⁻¹⁴	14,92	7,46
25	1,00.10 ⁻¹⁴	14,00	7,00
60	9,6.10 ⁻¹⁴	13,02	6,51

⇒ endotherm proces: K stijgt met T ↑

Afhankelijk van de relatieve hoeveelheid $[H_3O^+]$ t.o.v. $[OH^-]$ spreekt men van:

Zure oplossingen	$[H_3O^+] > [OH^-]$
Basische of alkalische oplossingen	$[H_3O^+] < [OH^-]$
Neutrale oplossingen	$[H_3O^+] = [OH^-]$

13.5.2 pH-schaal

$10^{-14} \leq [H_3O^+]_{ev} \leq 1$ $\longrightarrow$ Logaritmische schaal

$$14 \geq pH \geq 0$$

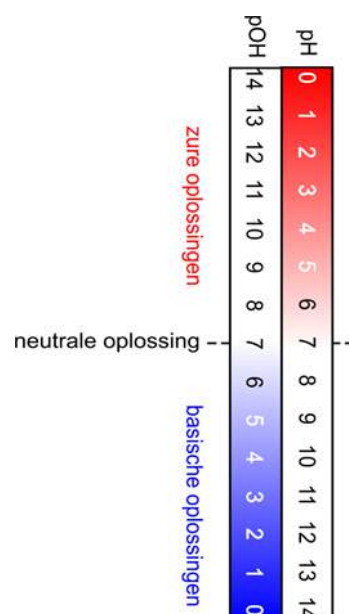
$$pH = -\log[H^+]$$

$$pOH = -\log[OH^-]$$

$$K_W = [H_3O^+]_{ev} [OH^-]_{ev} \quad pK_W = -\log K_W = pH + pOH = 14$$

Bij 25°C geldt:

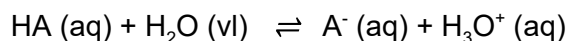
Zure oplossingen	$pH < 7$	$pOH > 7$
Basische of alkalische oplossingen	$pH > 7$	$pOH < 7$
Neutrale oplossingen	$pH = 7$	$pOH = 7$



Bronsted en Lowry:

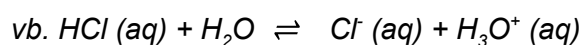
- Zuur: kan proton H^+ afgeven (hier: HA) (protondonor)
- Base: kan proton H^+ opnemen (hier: water) (protonacceptor)

zuur wordt opgelost in water:



- koppel HA/A^- = geconjugeerd zuurbasepaar
- A^- is de geconjugeerde base van HA
- HA is het geconjugeerde zuur van A^-

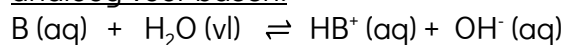
$$K_c = K_a = \frac{[H_3O^+]_{ev} [A^-]_{ev}}{[HA]_{ev}}$$



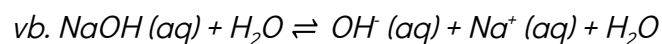
- Cl^- : geconjugeerde base van HCl
- H_3O^+ : geconjugeerde zuur van H_2O

zeer grote $K_a \rightarrow$ sterk zuur

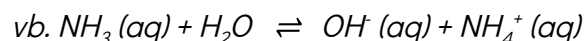
analoog voor basen:



$$K_c = K_b = \frac{[HB^+]_{ev} [OH^-]_{ev}}{[B]_{ev}}$$

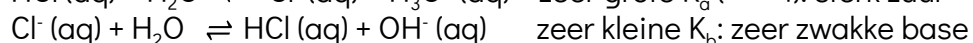
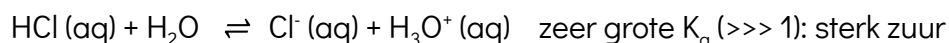


- OH^- : geconjugeerde base van H_2O
- Na^+ : geconjugeerde zuur van $NaOH$
-

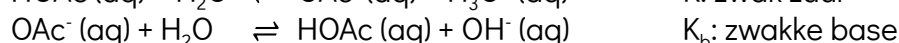
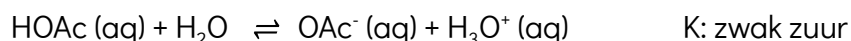


- OH^- : geconjugeerde base van H_2O ;
- NH_4^+ : geconjugeerde zuur van NH_3

!! Ammoniak is ook een base (niet het geval bij de Arrhenius definitie)



⇒ **Een sterk zuur heeft een zeer zwakke geconjugeerde base**, Cl^- zal niet reageren met water (=hydrolyseren)



⇒ **Een zwak zuur heeft een zwakke geconjugeerde base**, OAc^- zal reageren met water tot evenwicht bereikt is (=hydrolyseren)

Sterke zuren
1. Halogeenwaterstofzuren: HCl , HBr , HI
2. Oxozuren waarin het aantal zuurstofatomen het aantal ioniseerbare waterstofatomen met tenminste twee overtreft: HNO_3 , H_2SO_4 , $HClO_4$
Zwakke zuren
1. Fluorwaterstofzuur: HF
2. Zuren waarin H niet op O gebonden is: H_2S , HCN
3. Oxozuren waarin het aantal zuurstofatomen gelijk of 1 groter is dan het aantal ioniseerbare waterstofatomen: HNO_2 , $HClO$, H_3PO_4
4. Organische zuren (algemene formule $RCOOH$): CH_3COOH azijnzuur, $(COOH)_2$ oxaalzuur, C_6H_5COOH benzoëzuur.

$$pK_a = -\log K_a$$

⇒ Hoe sterker het zuur, hoe groter K_a , hoe kleiner pK_a

$\text{NaOH (aq)} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}^- \text{ (aq)} + \text{Na}^+ \text{ (aq)} + \text{H}_2\text{O}$ zeer grote K_b ($\gg 1$): sterke base
 $\text{Na}^+ \text{ (aq)} + 2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{NaOH (aq)} + \text{H}_3\text{O}^+ \text{ (aq)}$ zeer kleine K_a : zeer zwak
 $\Rightarrow$ **Een sterke base heeft een zeer zwak geconjugeerd zuur**, Na^+ zal niet reageren met water! (= hydrolyseren)

$\text{NH}_3 \text{ (aq)} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}^- \text{ (aq)} + \text{NH}_4^+ \text{ (aq)}$ K_b : zwakke base
 $\text{NH}_4^+ \text{ (aq)} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{NH}_3 \text{ (aq)} + \text{H}_3\text{O}^+ \text{ (aq)}$ K_a : zwak zuur
 $\Rightarrow$ **Een zwakke base heeft een zwak geconjugeerd zuur**, NH_4^+ zal reageren met water met vorming van NH_3 ! (= hydrolyseren)

Sterke basen (oplosbare metaalverbindingen die O^{2-} of OH^- bevatten)
1. Oxiden M_2O en hydroxiden MOH van alkalimetalen: $\text{M} = \text{Li, Na, K, Rb, Cs}$
2. Oxiden MO en hydroxiden M(OH)_2 van de aardalkalimetalen $\text{M} = \text{Ca, Sr, Ba}$
Wegens hun geringe oplosbaarheid worden MgO en Mg(OH)_2 niet als sterke basen gebruikt.

Zwakke basen (veel verbindingen met vrije elektronenparen)
1. Ammoniak NH_3
2. Organische amines (algemene formule RNH_2 , R_2NH en R_3N)

$$\text{p}K_B = -\log K_B$$

$\Rightarrow$ Hoe sterker de base, hoe groter K_B , hoe kleiner $\text{p}K_B$

Samenvatting:

Eigenschap	Sterk zuur	Zwak zuur
K_a	Zeer groot $K_a \gg 1$	Klein $K_a < 10^{-3}$
Evenwichtspositie	rechts	Links
Ionisatie	Quasi volledig	gering
Evenwichtsconcentratie $[\text{H}^+]$	$[\text{H}^+] \approx c_{\text{oHA}}$	$[\text{H}^+] \ll c_{\text{oHA}}$
Sterkte geconjugeerde base in vgl. met H_2O	A^- veel zwakkere base dan H_2O	A^- sterkere base dan H_2O
voorbeelden	HCl, HNO_3	$\text{HF, CH}_3\text{COOH, HSO}_4^-$

$$\begin{array}{ccccc}
 \text{HA (aq)} + \text{H}_2\text{O (vl)} & \rightleftharpoons & \text{A}^- \text{ (aq)} + \text{H}_3\text{O}^+ \text{ (aq)} & & K_c = K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]_{\text{ev}} [\text{A}^-]_{\text{ev}}}{[\text{HA}]_{\text{ev}}} \\
 \text{zuur1} + \text{base2} & & \text{base 1} + \text{zuur2} & &
 \end{array}$$

13.5.4 Oplossingen van monoprotische zwakke zuren in water

De mate waarin HOA_c is geïoniseerd = de ionisatiegraad α

$$\alpha = \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]_0}$$

!!! %-ionisatiegraad neemt toe met afnemende concentratie

13.5.5 Oplossingen van polyprotische zwakke zuren in water

→ bevatten meer dan 1 afsplitsbaar proton

→ het afsplitsen van protonen gebeurt stapsgewijs

$$\Rightarrow K_{a1} \gg K_{a2} \gg K_{a3}$$

13.5.6 Oplossingen van zwakke basen in water

Redenering identiek aan deze van zwakke zuren.

Zwakke basen reageren slechts gedeeltelijk met water

Algemeen geldt voor een corresponderend zuur-base-systeem/

- $K_a \times K_b = K_w$
- $\text{p}K_a + \text{p}K_b = \text{p}K_w = 14$

15.5.7 Oplossingen van zouten in water

Een zout toevoegen aan een oplossing kan de pH beïnvloeden. Hoe?

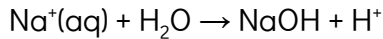
- Zouten zijn sterke elektrolyten en dus (in de mate dat ze oplossen) volledig gedissocieerd in ionen.
- Deze ionen ondergaan hydrolyse, d.w.z. kunnen, als Brönstedzuren of -basen, in meerdere of mindere mate reageren met water.

Algemeen geldt voor een geconjugeerd zuur-base-systeem

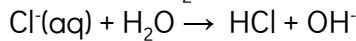
- $K_a \times K_b = K_w$
- $\text{p}K_a + \text{p}K_b = \text{p}K_w = 14$

1. Geconj. base van een sterk zuur
 $K_b \lll K_a \ggg \Rightarrow$ Geen invloed op pH
2. Geconj. zuur van een sterke base
 $K_a \lll K_b \ggg \Rightarrow$ Geen invloed op pH
3. Geconj. base van een zwak zuur
 $K_b \approx K_a \approx \Rightarrow$ Invloed op pH
4. Geconj. Zuur van een zwakke base
 $K_a \approx K_b \approx \Rightarrow$ Invloed op pH

13.5.7.1 Type NaCl

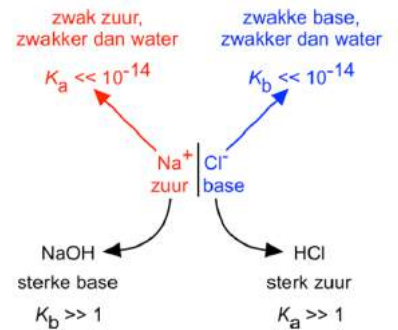


→ deze reactie gaat bijna niet door, want NaOH is sterke base $\Rightarrow \text{Na}^+$ is zeer zwak geconj. zuur en zal dus geen OH^- van H_2O kunnen afnemen

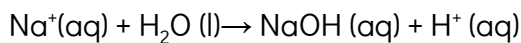


→ deze reactie gaat bijna niet door want HCl is sterk zuur $\Rightarrow \text{Cl}^-$ is een zeer zwakke geconj. base en zal dus geen H^+ van H_2O kunnen afnemen

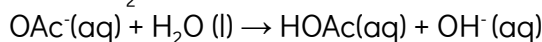
$\Rightarrow$ zouten die afgeleid zijn van een sterk zuur en een sterke base reageren neutraal



13.5.7.2 Type NaOAc

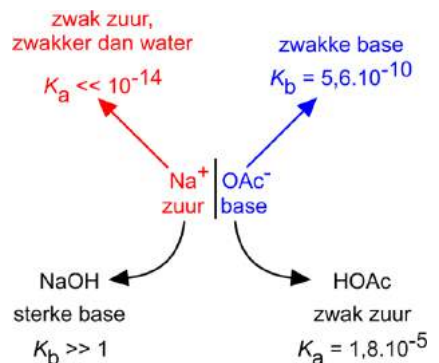


→ deze reactie gaat bijna niet door, want NaOH is sterke base $\Rightarrow \text{Na}^+$ is zeer zwak geconj. zuur en zal dus geen OH^- van H_2O kunnen afnemen

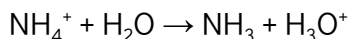


→ deze reactie gaat gedeeltelijk door want HOAc is zwak zuur $\Rightarrow \text{OAc}^-$ is een zwakke geconj. base en zal dus H^+ van H_2O kunnen afnemen

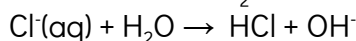
$\Rightarrow$ zouten die afgeleid zijn van een zwak zuur en een sterke base reageren zwak basisch



13.5.7.3 Type NH₄Cl

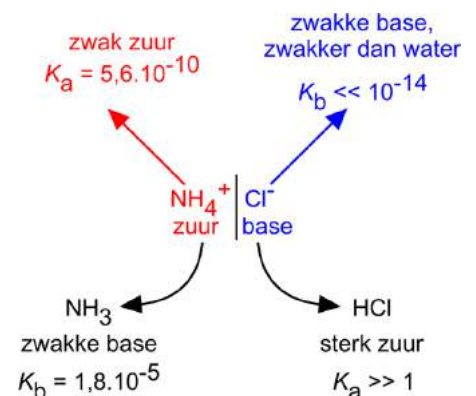


→ deze reactie gaat gedeeltelijk door, want NH_3 is een zwakke base $\Rightarrow \text{NH}_4^+$ is een zwak geconj. zuur en zal dus OH^- van H_2O kunnen afnemen



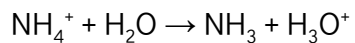
→ deze reactie gaat bijna niet door want HCl is sterk zuur $\Rightarrow \text{Cl}^-$ is een zeer zwakke geconj. base en zal dus geen H^+ van H_2O kunnen afnemen

$\Rightarrow$ zouten die afgeleid zijn van een sterk zuur en een zwakke base reageren zwak zuur.

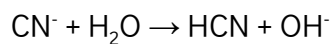


13.5.7.4 Type NH_4CN

→ geen oefeningen van kennen!



→ deze reactie gaat gedeeltelijk door, want NH_3 is een zwakke base $\Rightarrow \text{NH}_4^+$ is een zwak geconj. zuur en zal dus OH^- van H_2O kunnen afnemen



→ reactie gaat gedeeltelijk door, want HCN is zwak zuur $\Rightarrow \text{CN}^-$ zwak geconj. base en zal dus H^+ van H_2O kunnen afnemen

pH wordt bepaald door de relatieve sterkte van geconjugeerde zuur en base:

$\Rightarrow$ sterkste base/zuur bepaalt de pH.