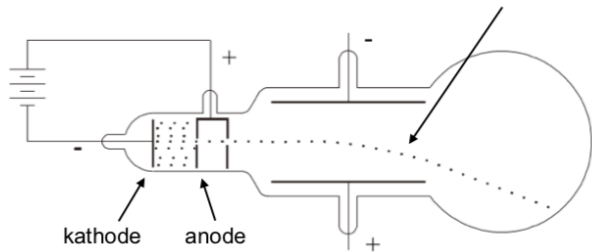


Chemie I: Begrippen

DEEL I: ATOMEN EN MOLECULEN

Inleiding	
Materie	Alles wat massa heeft en ruimte inneemt.
Zuivere stof	Vorm van materie die een uniforme chemische samenstelling heeft en die bestaat uit één soort moleculen.
Enkelvoudige stof	Een stof die is opgebouwd uit atomen van slechts één element.
Samengestelde stoffen	Zuivere stoffen die zijn opgebouwd uit atomen van meerdere elementen.
Hoofdstuk 1: Aanleiding voor de ontwikkeling van de kwantummechanica	
Atoommodel van Dalton (1808)	<ul style="list-style-type: none"> - Materie is samengesteld uit kleine, ondeelbare partikels. - Alle atomen van een gegeven element zijn identiek in hun eigenschappen en massa. - Verschillende chemische elementen bestaan uit verschillende atoomsoorten. Ieder atoomsoort bezit een karakteristieke m. - Atomen zijn onverwoestbaar, kunnen niet gecreëerd worden, en behouden hun identiteit na een scheikundige reactie. - Chemische verbindingen worden gevormd door combinatie van atomen van verschillende elementen in verhoudingen van gehele getallen. - In chemische reacties worden atomen herschikt, van elkaar gescheiden en met elkaar gecombineerd.
Kathodestraalbuis	<p>Of ontladingsbuis bestaat uit een glazen buis waarin een gas bij lage druk zit opgesloten, en waarin 2 elektroden zijn aangebracht.</p> 
Plum pudding model	Wolk van uniforme positieve lading waarin de negatief geladen elektronen willekeurig verdeeld waren en bewogen. (Thompson)
Radioactiviteit	<p>Fenomeen waarbij onstabiele elementen spontaan straling afgeven. De straling van uranium kan door een elektrisch veld geleid worden en splitst dan in 3 bundels;</p> <ul style="list-style-type: none"> • <u>-straling</u>, niet door het elektrisch veld beïnvloed, dus een zeer hoge frequente elektromagnetische straling. • <u>-straling</u>, wordt afgebogen door elektrisch veld richting positieve elektrode; bestaat dus uit negatief geladen deeltjes. • <u>-straling</u>, wordt afgebogen door elektrisch veld richting negatieve elektrode; bestaat dus uit positief geladen deeltjes. Door Rutherford aangetoond; stroom helium-ionen.
Experiment van Rutherford	<p>Bestraling van dunne metaalfolies met een bundel α-stralen.</p> <ul style="list-style-type: none"> ⇒ In het centrum van het atoom is een kleine, zware, positief geladen kern aanwezig, omringd door een aantal zeer lichte, negatief geladen elektronen. ⇒ Atoom bestaat uit een kern (grootste fractie van de massa) en e^- in een ijle structuur rond de kern

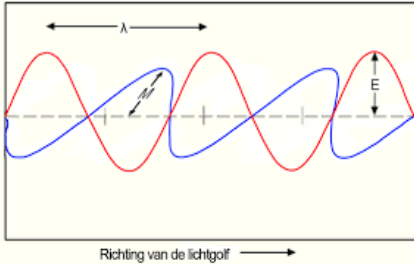
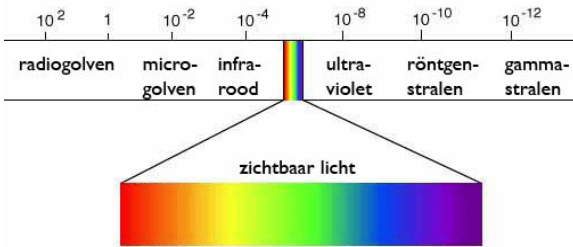
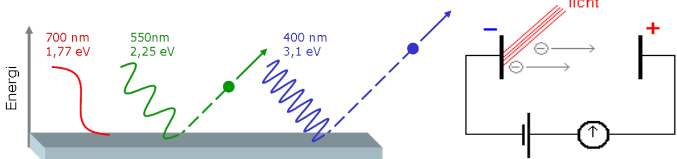
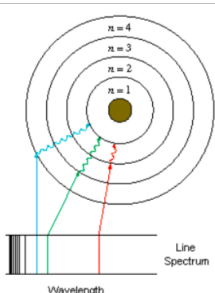
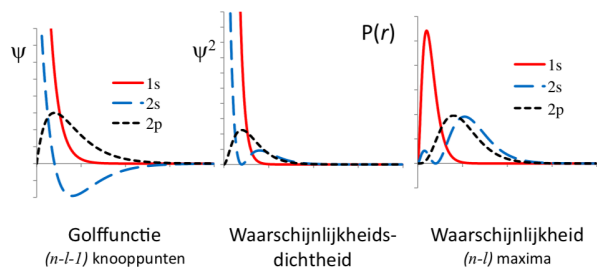
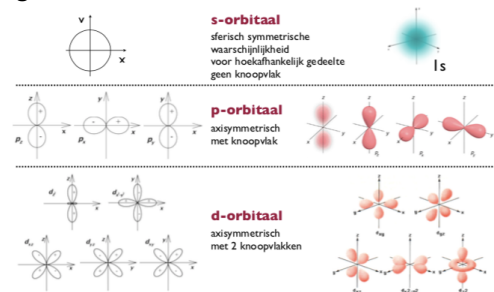
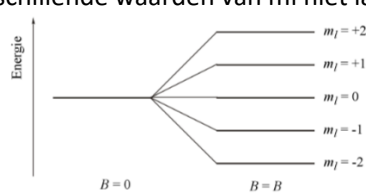
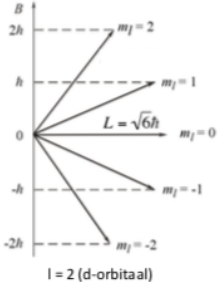
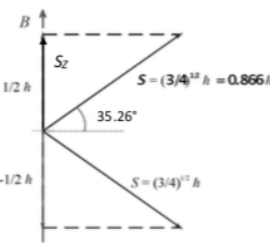

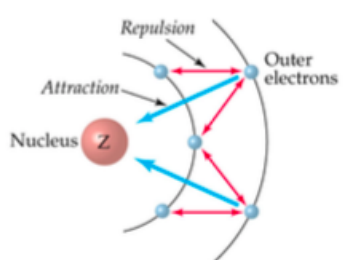
Elektromagnetische golf	<p>Het zeer snel periodisch wisselen van het elektrisch veld E en het magnetisch veld B. (transversale golf)</p> 
Golflengte	De afstand tussen 2 nabijgelegen toppen of dalen met identieke amplitude. Notatie: (SI-eenheid: m)
Frequentie	Het aantal golflengten van de golf die per tijdseenheid (gewoonlijk 1s) aan een bepaald punt voorbijkomen. Notatie: (SI-eenheid: Hz).
Elektromagnetisch spectrum	<p>De verschillende frequenties en de golflengten, van elektromagnetische golven die verschillende lichtstralen weergeven.</p> 
Optisch zwart object	Geïdealiseerd object dat alle straling van alle golflengten, ontvangen onder iedere hoek, perfect absorbeert.
Zwart lichaam	<p>Caviteit (holle ruimte) met een heel klein gaatje in de wand: iedere golf die de caviteit binnendringt via dit gaatje wordt door het materiaal van de wanden ofwel eindeloos gereflecteerd op de binnenwanden, zodat de straling met zeer grote waarschijnlijkheid niet terug uit de caviteit zal stralen via het gaatje.</p> <ul style="list-style-type: none"> ⇒ Bijzondere eigenschap; ieder object is in thermisch evenwicht met zijn omgeving; dus het zendt precies evenveel straling uit als het absorbeert = <i>Kirchhoff's wet van de thermische straling</i>. ⇒ Zwart lichaam is een perfecte straler en absorber; bij elke temperatuur zendt een zwart lichaam evenveel of meer thermische straling uit dan eender welk ander lichaam.
Radiantie van een zwart lichaam	“Energie” = de stralingsintensiteit (uitgestraald vermogen per steradiaal) per eenheid van oppervlak en per eenheid van golflengte van zwarte lichaamsstraling enkel afhankelijk is van T°
Zwarte lichaamsstraling spectrum	<p><u>Probleem van Rayleigh:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - Alle toegelaten trillingstoestanden komen daadwerkelijk voor en iedere golf heeft een $E = kT$ (equipartitie) - E per golf is proportioneel met het kwadraat van de amplitude van de golf (en niet met de frequentie). <p><u>Oplossing Planck:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - Alle toegelaten trillingstoestanden hebben een zekere waarschijnlijkheid (bepaald door ν) en iedere golf heeft een $E = h\nu$ $\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} h\nu \frac{1}{e^{(h\nu/kT)} - 1} d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{(h\nu/kT)} - 1} d\nu = \text{Stralingswet van Planck}$ <ul style="list-style-type: none"> ⇒ Gemiddelde E per trillingstoestand bij hogere ν daalt sneller dan toestandsdichtheid stijgt en dus geen UV catastrofe.

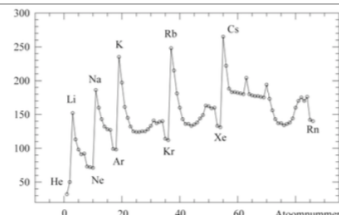
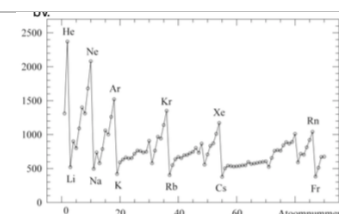
Foto-elektrisch effect	<p>Verschijnsel dat e- die niet zo sterk gebonden zijn aan een atoom, loskomen nadat ze voldoende E opnemen van invallend licht (UV-straling).</p>  <p>Probleem van Lenard:</p> <ul style="list-style-type: none"> - De maximale kinetische E van de foto-elektronen wordt niet bepaald door de intensiteit van het ingestraalde licht. (zoals men had verwacht door de klassieke natuurkunde) - Monochromatisch licht met een lager dan een bepaalde is niet in staat foto-elektronen op te wekken. <p>Oplossing van Einstein:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Licht bestaat niet uit continue golven maar uit discrete golfpakketjes = fotonen met $E = h\nu$ - De maximale kinetische E wordt bepaald door de E vh foton min de "uittree-E" (= E die het foto-elektrisch e- nodig heeft om zich los te maken vd metaalplaat) - Het verhogen vd intensiteit vd invallende straling betekent dat per tijdseenheid meer fotonen op de metaalplaat zullen invallen, en dat er dus meer foto-elektronen zullen ontstaan, zonder dat daardoor de kinetische E vd e- beïnvloed wordt.
Foto-elektron	Ontstaat als gevolg van de absorptie van 1 foton, waarbij de energie vh foton overgedragen wordt aan het elektron.
Lijnspectrum	Licht is geen continue variatie in frequenties, maar door de atomen wordt licht slechts met welbepaalde, scherp afgeijnde frequenties uitgestraald.
Duaal karakter (EM-straling)	Enerzijds moet zij beschreven worden als een <u>golfverschijnsel</u> (diffractie en interferentie), maar anderzijds moet zij een <u>deeltjeskarakter</u> hebben (zwarte lichaamsstraling en foto-elektrisch effect)
1 ^e postulaat van Bohr	<ul style="list-style-type: none"> - e- beschrijft een cirkelvormige baan om de kern. - Kwantisering vd draai-impuls: met - e- in stationaire toestand zendt geen EM uit. (deze veronderstelling verklaart de lijnspectra van atomen)
2 ^e postulaat van Bohr	<ul style="list-style-type: none"> - transitie = overgang vd ene stationaire toestand naar de andere. - (de-) excitatie door op- en afname van fotonen <p>⇒ Verklaring voor de <u>lijnspectra van atomen</u>; e- in een atoom kunnen slechts welbepaalde E niveaus bezetten en wanneer een e- ve hoger naar een lager E niveau terugvalt, nemen we de hierbij uitgezonden straling waar als licht met een .</p> 
Coulomb kracht	De elektrostatistische aantrekking tussen de kern en het elektron.
Potentiële E van het elektron	De arbeid die nodig is om het elektron van op oneindige afstand tot de kern te brengen tot op een afstand gelijk aan de straal van de beschouwde baan.
Ionisatie-energie	De energie die nodig is om het elektron vanuit zijn laag-energetische baan te verwijderen (= <i>ionisatie-potentiaal</i>).
Bohr model: magnetisme	<p>Baan van e- induceert een magnetische dipool M, evenwijdig aan draai-impuls.</p> <p>Realiteit: H-atoom heeft inderdaad een magnetisch dipoolmoment maar van andere grootte.</p> $M = -\frac{e}{2m_e} L$ $M = -\frac{n\hbar e}{2m_e}$

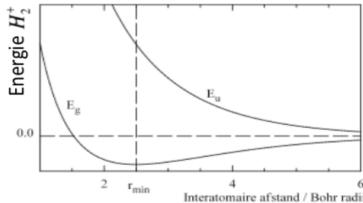
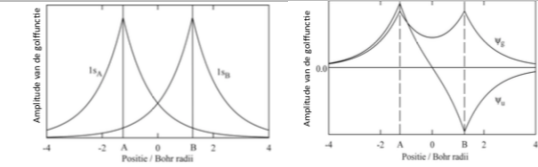
Successen atoommodel van Bohr	<ul style="list-style-type: none"> - Energieniveaus H-atom (lijnspectra) en ionen met $1e^-$ - Ionisatie-energie H-atom - Waarde van de Rydberg constante (R)
Falen atoommodel van Bohr	<ul style="list-style-type: none"> - Atoommodel slaagt er niet in om energieniveaus te berekenen van een atoom met meerdere elektronen. - Draai-impuls van het elektron bij het waterstofatoom is 0 (uit spectroscopische metingen), terwijl Bohr hier een waarde aan toekent h. - Geen verklaring opsplitsing spectraallijnen in aanwezigheid van magnetisch veld. - Een elektron zendt geen straling uit wanneer het zich in een "toegelaten" baan bevindt (tegenspraak theorie Maxwell).
Hoofdstuk 2: Golfmechanica van het H-atom	
Hypothese De Broglie	<p>EM-straling heeft een golf-deeltjes dualiteit, voor de beschrijving van materie de tekortkomingen van de deeltjes theorie opgevangen werden door een kwantisering van de draaiimpuls.</p> <p>voor materie bestaat dezelfde deeltjes dualiteit, aantal aspecten vd beweging van een deeltje kan worden beschreven met behulp van een golf en deze golf moet dezelfde eigenschappen hebben als fotonen. Experimenteel bevestigd adv interferentiepatronen bekomen met elektronen.</p>
Karakteristiek gevolg golfeigenschappen	Microscopische systemen kunnen slechts voorkomen in toestanden met welbepaalde, discontinue energieën. Gekwantiseerde stationaire toestanden n .
Operator	Een wiskundig proces waarbij een bepaalde operatie wordt uitgevoerd op een functie, hetgeen (gewoonlijk) resulteert in een nieuwe functie.
Hamiltoniaan-operator	De operator waarmee de energie als waarneembare grootheid overeenkomt. De som van een kinetische en een potentiële energie-operator.
Kwantumgetallen	In de fysische aanvaardbare oplossingen (die stationaire toestanden van het systeem beschrijven) komen slechts discrete gehele waarden voor.
Onzekerheids-principe van Heisenberg	Door de golfeigenschappen van een deeltje, is het onmogelijk om op hetzelfde ogenblik met hoge precisie de plaats en het impuls van een deeltje te kennen.
Waarschijnlijkheids-verdeling	<p>De golf functie heeft enkel een statische betekenis, en heeft dus geen exacte baan. De waarschijnlijkheid om een deeltje aan te treffen in een volume-element dv.</p> <ul style="list-style-type: none"> ⇒ Kwantummechanisch resultaat; verschillende afstanden die slechts een bepaalde waarde kunnen aannemen (verschil met Bohr-model; constante straal). ⇒ Meest waarschijnlijke r komt overeen met de laagst-energetische baan in het Bohr model.
Voerstraal r	Afstand tussen en de kern en de elektronen. (coördinaat voor waarschijnlijkheidsverdeling)
Orbitaal	Wiskundige functie die het golfgedrag van een elektron in een atoom (of in een molecule) beschrijft. 3D-waarschijnlijkheidsverdeling die het gedrag van e^- in een atoom beschrijft baan van het e^-
Oplossen van Schrödinger-vergelijking	Wiskundige oplossing voor de differentiaalvergelijking die bestaat uit een set van golf functies en overeenkomstige energieën die samen alle mogelijke fysische aanvaardbare toestanden van het systeem beschrijven.
Radiale gedeelte van de golf functie	<p>Functie R = enkel afhankelijk van de afstand van de kern tot het elektron.</p> <p>Wiskundig; radiale golf functies zijn het product van een exponentiële functie en een polynoom van r/a_0.</p> <p>Golf functie neemt exponentieel af met de afstand tot de kern.</p>

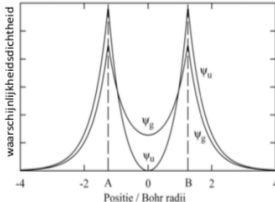

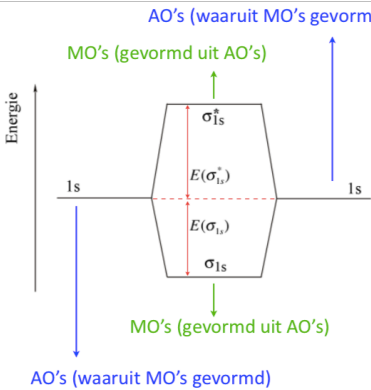
	 <p>Golffunctie ($n-l-l$) knooppunten Waarschijnlijkheidsdichtheid Waarschijnlijkheid ($n-l$) maxima</p> <p>Gekarakteriseerd door 2 kwantumgetallen, n en l;</p> <ul style="list-style-type: none"> - Wanneer n groter wordt, wordt de waarschijnlijkheids-verdeling v.h. e- diffuser => e- wordt minder en minder op 1 bepaalde afstand teruggevonden. (l beïnvloedt de gemiddelde afstand tot de kern niet!)
Hoekafhankelijk gedeelte vd golffunctie	<p>In functie van de hoek. Angulaire golffunctie = wiskundig; sferisch harmonische functies. Zij bepalen de vorm van de orbitalen.</p> <p>Gekarakteriseerd door 2 kwantumgetallen l en m_l;</p> <ul style="list-style-type: none"> - De golffuncties voor de s-orbitalen bevatten geen hoekafhankelijke factor => hoekafhankelijk gedeelte vd waarschijnlijkheid in alle richtingen heeft dezelfde waarde.  <p>s-orbitaal sferisch symmetrische waarschijnlijkheid voor hoekafhankelijk gedeelte geen knooppvlak</p> <p>p-orbitaal axiësymmetrisch met knooppvlak</p> <p>d-orbitaal axiësymmetrisch met 2 knooppvlakken</p>
Ontaarde toestanden	<ul style="list-style-type: none"> - NKG; Toestanden met dezelfde n, maar een verschillende waarde van l, die steeds dezelfde energie hebben (bv H-atom). - MKG; in afwezigheid van een uitwendig veld, toestanden voor het H-atom met gelijke n en l waarden maar verschillende waarden van m_l. Maar is aanwezigheid van een extern veld; opheffing van ontaarding.
Zeemaneffect (Pieter Zeeman, Nederland 1865-1943)	<p>Stel dat het gedrag van de atomaire dipool hetzelfde is als die van de kompasnaald (magnetische dipool richt naar uitwendig veld)</p> <ul style="list-style-type: none"> - Verwachtingen: door de interactie van de atomaire magnetische dipool met het magneetveld gaan de spectraallijnen van het H-atom verschuiven. - Werkelijkheid: niet alleen verschuivingen, ook opsplitsingen spectraallijnen in een aantal componenten. <p>⇒ atomaire magnetische dipool klassieke magnetische dipool</p>
Spectraallijn	<p>Deel van het elektromagnetisch spectrum waar een chemische stof of een voorwerp zich anders gedraagt dan in de omgeving van dat deel.</p>
Opheffing van de ontaarding	<p>Door de interactie met een uitwendig veld zullen toestanden met een verschillende waarden van m_l niet langer dezelfde E hebben.</p>  <p>Opheffing van ontaarding in extern veld B</p>
Spinmagnetisch moment	<p>Omwille van de negatieve lading van een elektron, antiparallel is aan zijn draai-impuls vector S.</p>

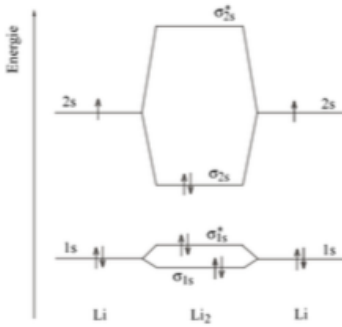
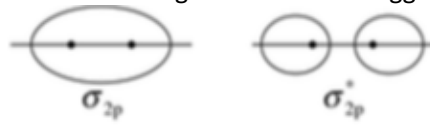
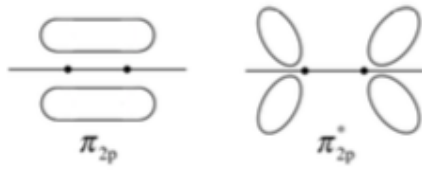
Elektron spin draai-impuls	<p>Anomale Zeeman effect: verdere opsplitsing tgv plaatsing in extern magnetisch veld.</p> <p>⇒ Oorzaak; magnetische moment niet enkel veroorzaakt door orbitaal draai-impuls v.h. e⁻, maar ook spin draai-impuls.</p>
Orbitaal vs spin draai-impuls	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;"> <p>Orbitaal draai-impuls</p> $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad \mathbf{M} = -\frac{e}{2m_e}\mathbf{L}$ $L_z = m_l\hbar$ $m_l \in \{-l; l\} \quad (2l+1 \text{ waarden})$  <p>$l = 2$ (d-orbitaal)</p> </div> <div style="text-align: center;"> <p>Spin draai-impuls</p> $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad \mathbf{M}_s = g\frac{q}{2m}\mathbf{S}$ $S_z = m_s\hbar$ $m_s = \{-1/2; 1/2\} \quad (2 \text{ waarden})$  </div> </div>
Hyperfijn-interactie	<p>Adhv de Schrödingervgl; oplossingen bevatten geen info over de spin van het elektron. Maar bij het H-atoom, toestanden met dezelfde n, l en m_l, vertonen de “spin-up” toestanden eenzelfde ruimtelijke waarschijnlijkheidsverdeling als de “spin-down”.</p> <p>⇒ Niet helemaal juist; de kern heeft ook een spin, en het kernmagnetisch moment dat hieruit volgt is een zwakke magnetische interactie met de elektronspin (zeer kleine invloed, wordt verwaarloosd)</p>
Knoopvlak	Het vlak (x,y)-vlak van het p-orbitaal waarin de waarschijnlijkheidsdichtheid 0 is.
Axiaalsymmetrische lobben	De 3D hoekwaarschijnlijkheid verkregen wordt door ieder van de lobben om zijn eigen lengte-as te roteren.
Contourlijnen	Krommen die ontstaan wanneer we de waarschijnlijkheids-dichtheid berekenen in een groot aantal punten van een vlakke doorsnede van de ruimte, en de punten met dezelfde dichtheid met elkaar verbinden.
Contourdiagram	Het geheel van contourlijnen in een vlak, vaak getekend met constant dichtheidsinterval.
Verschil Bohr en golf mechanische beschrijving	<p>Het resultaat bij de waarschijnlijkheidsverdeling voor een e⁻ in de laagst energetische toestand v.h. H-atoom is verschillend met het gedrag in het Bohr-atoom. In het Bohr-atoom doorloopt het e⁻ een baan met constante r, wat betekent dat de opeenvolgende metingen v.d. e⁻ kern afstand steeds dezelfde waarden hebben maar bij de waarschijnlijkheidsverdeling is dit niet het geval. Als het NKG l = 0 dan zou het e⁻ moeten stilstaan en zou het atoom ophouden met bestaan, als l verschilt van 0, dan is de waarde v.d. draai impuls nooit gelijk aan het HKG in het postulaat van Bohr.</p>
Hoofdstuk 3: Meerelektronenatomen	
Neutron	Neutrale deeltjes waarvan de massa nagenoeg hetzelfde is als die van protonen.
Atoomnummer	Het aantal protonen in een kern. Symbool: Z
Massagetal van een kern	De som van het aantal protonen en het aantal neutronen. Symbool: A
Isotopen	Het naast elkaar bestaan van kernen met eenzelfde aantal protonen maar een verschillend aantal neutronen; voor zowat alle atoomsoorten zijn verschillende isotopen bekend.

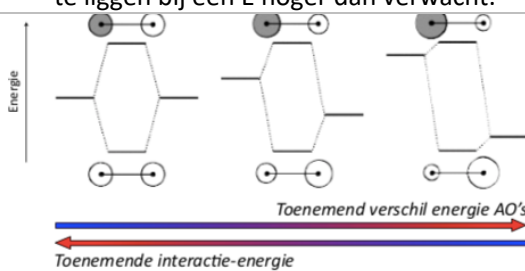

	 <p>Bv. De isotopen van waterstof</p>
Abundantie	Fractie waarin iedere isotoop voorkomt, wanneer een natuurlijk voorkomend element samengesteld is uit meerdere isotopen.
Tabel van Mendelejev	Systematische opsomming van de chemische element, gerangschikt naar stijgende massa en naar chemische verwantschap.
Relatieve atoommassa	De verhouding van de massa $m(a)$ van een atoom tot de massaconstante $m(u)$. $m(u) =$
Sterke kernkracht	Aangezien protonen dezelfde lading hebben stoten ze elkaar af en door de uiterst kleine afmetingen van een kern zitten ze heel dicht op elkaar. Om te voorkomen dat de kernen door deze afstoting uit elkaar zouden spatten, moeten de protonen en neutronen samengehouden worden door een bijzonder sterke kracht.
Massadefect	De massa van de kern van een atoom is kleiner dan de som van de totale massa van protonen en de totale massa van neutronen.
Centraal potentiaalveld	Potentiaalveld waarvan alle punten met gelijke potentiaal gelegen zijn op een boloppervlak rond 1 centraal punt.
Penetratie-effect	<p>Voor meer-systeem, gaat elk toegevoegde- interfereren met het potentiaalveld van een ander</p> <p>$E(ns) < E(np) < E(nd) < \dots$</p> <ul style="list-style-type: none"> - Radiale waarschijnlijkheidsverdelingen; e- uit een hogere schil houden soms heel dicht bij de kern op. \Rightarrow e- is diep doordrongen in het gebied vd lager gelegen e-, waardoor hun afscherming vd kern-potentiaal vermindert. (beïnvloedt de gem potentiële E vh e-) \Rightarrow Orbitalen in dezelfde hoofdschil en verschillende onderschil zijn niet langer ontaard. (dezelfde l, verschillende ml wel ontaard) - <u>Verlaagt</u> de energie van een orbitaal met lager NKG t.o.v een orbitaal met hoger NKG binnen dezelfde schil. E neemt toe met nevenkwantumgetal.
Elektronen-repulsie	<p>e- stoten elkaar af omdat ze dezelfde lading dragen. Deze afstoting is proportioneel met de overlap vd orbitalen waarin deze e- zich bevinden.</p> <p>ER <u>verhoogt</u> de energie van een orbitaal met een hoger NKG t.o.v een orbitaal met een lager NKG binnen eenzelfde schil.</p> <p>Bv. $E(2s) < E(2p) = E(2) = E(2)$</p> 
Pauliverbod	Geen 2 e- in eenzelfde atoom kunnen dezelfde 4 kwantum-getallen hebben (n, l, ml, ms) = Geen 2 e- in eenzelfde systeem bevinden zich in dezelfde kwantumtoestand.
Aufbau principe	<p>Laagst energetische toestand = grondtoestand:</p> <ul style="list-style-type: none"> - De E van een e- stijgt met zijn HKG n; - Binnen eenzelfde schil stijgt de E van een e- met zijn NKG l.
Regel van Hund	<p>= De regel van maximale multipliciteit;</p> <p>Wanneer meerder e- in een verzameling ontaarde orbitalen aanwezig zijn, dan heeft de configuratie met het maximale aantal door het Pauliverbod toegelaten evenwijdige spins de laagste E.</p>
Edelgas-configuratie	Elke elektronenconfiguratie waarin de s- en de p-orbitalen van de hoogste schil helemaal gevuld zijn.

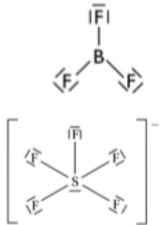
Valentie-elektronen	Elektronen die zich in de buitenste schil ve atoom bevinden. Zij bepalen de chemische eigenschappen van het element.																				
Overgangs-metalen	<p>Atomen die sterk verwant zijn aan het kalium atoom dwz dat het laatste e- zich in het s-orbitaal ve nieuwe schil bevindt. Het blijkt indd dat 3d-orbitalen iets hoger in E zijn dan 4s-orbitalen</p> <p>⇒ Eerste 2 elementen na Ar, K en Ca eerst de 4s-schaal opvullen. Daarna pas de 3d-orbitalen.</p> <table><tr><td>Sc</td><td>Ti</td><td>V</td><td>Cr</td><td>Mn</td><td>Fe</td><td>Co</td><td>Ni</td><td>Cu</td><td>Zn</td></tr><tr><td>3d¹4s²</td><td>3d²4s²</td><td>3d³4s²</td><td>3d⁵4s¹</td><td>3d⁵4s²</td><td>3d⁶4s²</td><td>3d⁷4s²</td><td>3d⁸4s²</td><td>3d¹⁰4s¹</td><td>3d¹⁰4s²</td></tr></table>	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	3d ¹ 4s ²	3d ² 4s ²	3d ³ 4s ²	3d ⁵ 4s ¹	3d ⁵ 4s ²	3d ⁶ 4s ²	3d ⁷ 4s ²	3d ⁸ 4s ²	3d ¹⁰ 4s ¹	3d ¹⁰ 4s ²
Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn												
3d ¹ 4s ²	3d ² 4s ²	3d ³ 4s ²	3d ⁵ 4s ¹	3d ⁵ 4s ²	3d ⁶ 4s ²	3d ⁷ 4s ²	3d ⁸ 4s ²	3d ¹⁰ 4s ¹	3d ¹⁰ 4s ²												
Periodiek systeem	<p>Manier om chemische elementen te ordenen. De ordening gebeurt op basis van het <u>atoomgetal</u>, <u>elektronenconfiguratie</u> en de <u>overeenstemmende chemische eigenschappen</u>.</p> <p>Bestaat uit;</p> <ul style="list-style-type: none">- 18 kolommen, <i>groepen</i>, aantal valentie-elektronen- 7 rijen, <i>perioden</i>, aantal schillen- Linksboven het lichtste atoom (met atoomnummer 1) en rechtsonder het zwaarste (met atoomnummer 118).																				
Periodische wet	Wanneer de chemische elementen worden gerangschikt volgens stijgende massa dan blijken zij een periodische variatie te vertonen in hun fysische en chemische eigenschappen. (basis PSE)																				
Covalentstraal/ atoomstraal	<p>Afstand tussen 2 covalent met elkaar gebonden atomen. Bepaald door de effectieve kernladingen.</p> <ul style="list-style-type: none">- Binnen periode, afname straal met toenemend atoomnummer- Binnen groep toename straal (want steeds extra schil). 																				
Effectieve kern-lading	Lagerliggende e- schermen de kernlading af. De elektrische lading die de potentiële E van een ve- bepaalt, is dan bij benadering (door penetratie-effect) gelijk aan, de echte kernlading verminderd met het aantal e- die in lagere schillen zitten.																				
1 ^{ste} ionisatie-potentiaal	<p>E die nodig is om het e- dat in grondtoestand vh atoom het orbitaal met de hoogste E bezet, volledig uit gasvormige neutrale atoom te verwijderen. (tot op oneindige afstand)</p> <p>⇒ Waarde /mol</p> <ul style="list-style-type: none">- Binnen een periode, toename IP (edelgassen hebben hoogste IP's)- Binnen een groep, afname IP 																				
Elektronaffiniteit	<p>E die vrijkomt wanneer een gasvormig neutraal atoom ve bepaald element een e- opneemt ter vorming ve negatief geladen ion (gevormde ion heeft E afgegeven negatief getal)</p> <p>Hoe negatiever de elektronaffiniteit hoe stabiel het ion.</p>																				
Elektro-negativiteit	De mate waarin een atoom van dat element de neiging vertoont om bindende elektronen naar zich toe te trekken.																				
Hoofdstuk 4: Moleculaire orbitaaltheorie																					
Ionaire binding	Volledige overdracht van 1 of meerdere e- van het ene naar het andere atoom (ionen worden bijeen gehouden door elektrostatische aantrekking tussen – en + ion).																				
Covalente binding	2 elektronen worden door de 2 atomen gedeeld. Samen-gebruiken van e- door beide atomen waartussen een chemische binding gevormd wordt = belangrijk kenmerk!																				

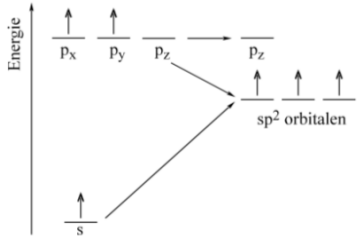
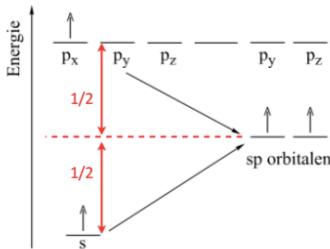
Schrödinger-vergelijking	Via het oplossen van deze vergelijking kunnen we de gekwantiseerde energieniveaus voor het systeem berekenen & wordt de bijhorende golf functies berekend; hiermee wordt de waarschijnlijkheid een e- aan te treffen in ieder willekeurig gekozen volume element berekend
MO-theorie	Model bestaat uit een set van wiskundige vergelijkingen, die een zeer fysieke realiteit beschrijven. Gebaseerd op <u>LCAO = Lineaire Combinatie van Atoom Orbitalen</u> Basisconcept; de elektronenwolken van atomen (AO's) met elkaar overlappen en zo aanleiding geven tot nieuwe elektronenwolken (MO's)
Normalisatie constanten	Factoren die ervoor moeten zorgen dat de totale waarschijnlijkheid om het e- aan te treffen in g en u juist gelijk is aan 1. Ng & Nu
Energie H ₂ -ion	<p>Hangt af van de afstand tussen de 2 protonen</p>  <p>Nulpunt E_g = <u>ongebonden toestand</u> (H-atoom + proton op oneindige afstand, omwille vd grote afstand is de interactie tussen de 2 gereduceerd tot 0 dwz geen chemische binding aanwezig). Minimum E_g = <u>evenwichtstoestand</u> (molecule heeft max stabilisatie bereikt; toestand naar waar de molecule zal evolueren) de afstand op dit moment tussen beiden protonen = bindingslengte ($r_{min} = 2,5$).</p>
Bindend orbitaal	<p>Orbitaal dat verantwoordelijk is voor de vorming van de chemische binding. (attractief)</p> <ul style="list-style-type: none"> - E is negatief (tenzij voor zeer kleine afstanden) - Stabilisatie door r te verkleinen - Stabieler dan ongebonden
Bindingsenergie	Hoeveelheid E die vrijkomt wanneer de chemische binding gevormd wordt maw de hoeveelheid E die moet toegevoegd worden om de chemische binding te breken (= dissociatie-energie).
Antibindend orbitaal	<ul style="list-style-type: none"> - E steeds hoger dan in ongebonden toestand => onstabiel - Stabilisatie door r te vergroten en E naar 0 te laten gaan - Stel e- zit in deze orbitaal zal het ion spontaan dissociëren. <p>⇒ Repulsieve toestand</p>
Overlap-integraal	<p>De sterkte van de overlap tussen de golf functie van atoom A en een golf functie van atoom B. Integratie verloopt over de gehele ruimte. het is een belangrijke maat voor de beoordeling van de sterkte vd binding.</p> $S_{AB} = \int \psi_A^* \psi_B dv$
Molecuulorbitalen	 <p>strekken zich uit over de hele molecule (maken dus gedeeltelijk gebruik vd e-).</p> <ul style="list-style-type: none"> - zijn verschillend van 0 in het gebied tussen de kernen. (behalve 1 punt voor). - Gaan naar 0 in het gebied niet gelegen tussen de kernen. - Overlap-integraal; veel overlap tussen de kernen. <p>⇒ -ion; combinatie van 2 1s-orbitalen (AO's) ter vorming van 2 MO's (bindend en antibindend orbitaal)</p>

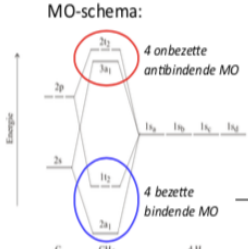
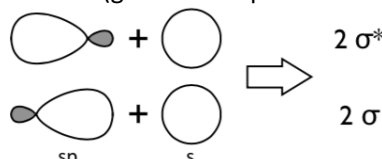
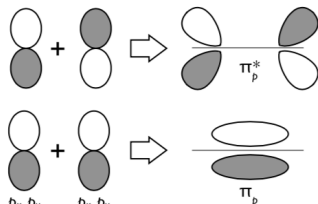
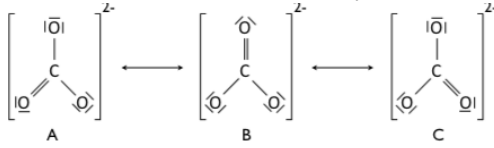
<p>Waarschijnlijkheidsdichtheid H_2^+</p>	<ul style="list-style-type: none"> - <u>Bindende orbitalen</u>; concentratie e- tussen de kernen dan buiten de kernen want de totale amplitude is hoger dan erbuiten. Waarschijnlijkheidsdichtheid is groter tussen. (geeft aanleiding tot chemische bindingen). - <u>Antibindende orbitalen</u>; aftrekken amplitudes, dus het gebied tussen de kernen heeft een lagere amplitude, dus lagere waarschijnlijkheidsdichtheid (concentratie e- buiten kernen) 
<p>Vorm van MO</p>	<p>MO die samengesteld uit AO zonder hoekafhankelijke => MO ook geen hoekafhankelijke. e- densiteit in hele gebied rond de kernen.</p> 
<p>Algemene vorm van LCAO (homonucleaire diatomische moleculen)</p>	$\psi_n = \sum a_{n,i} \phi_{A,i} + \sum b_{n,j} \phi_{B,j}$ <p><i>complexere moleculen</i></p> <p>Voor iedere 1 bepaalde AO vd samenstellende atomen heeft gewoonlijk een veel grotere bijdrage dan alle andere AO's.</p> <p>Dit wilt zeggen dat de MO's gevormd worden uit de overlap van slechts 1 AO v/h ene atoom met hetzelfde AO v/h andere atoom.</p> <p>(E en symmetrie bepalen hoe belangrijk de AO juist is)</p> $\psi = c_A \phi_A + c_B \phi_B$ <p>Homonuclear: $c_A = c_B$</p>
<p>Orbitaal energie diagramma</p>	 <ul style="list-style-type: none"> - E van bindend orbitaal – - E van antibindend orbitaal + - Voor ieder koppel bindend/antibindend MO is het antibindende karakter v/h antibindend orbitaal groter dan het bindend karakter v/h bindend orbitaal, omdat (de stabilisatie E is dus kleiner dan de destabilisatie E) <p>⇒ Antibindend orbitaal is iets verder verwijderd v/d 1s orbitalen</p>
<p>Pauliverbod MO's</p>	<p>In een bindend of antibindend molecuulorbitaal kunnen maximum 2 e- met tegengestelde spins ondergebracht worden.</p>
<p>Ontaarde MO's</p>	<p>Er bestaan MO's die verschillende toestanden beschrijven maar toch dezelfde E hebben.</p>
<p>Regel van Hund voor MO's</p>	<p>De grondtoestand van een elektronenverdeling wordt verkregen door de e- in ontaarde orbitalen zo op te stellen dat een maximaal aantal evenwijdige spins verkregen wordt.</p>

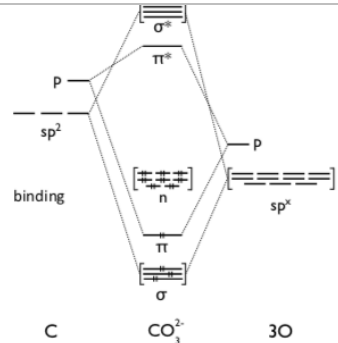
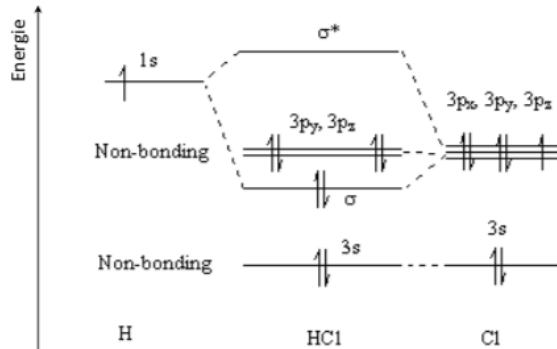
Bindingsorde	<p>Van een chemische binding wordt gevonden door het aantal e- paren in bindende MO's te verminderen met het aantal e- paren in antibindende MO's.</p> $n = \frac{\# e^- (\text{bindende MO}) - \# e^- (\text{antibindende MO})}{2}$ <p>Symbol: n</p>
Hogerliggende MO	<p>Ook de hogergelegen, niet-gevulde AO's combineren met elkaar om MO's te vormen, omdat MO's eveneens het Pauliverbod gehoorzamen, zal het verkrijgen vd grondtoestand ve neutrale molecule nooit nodig zijn om e- te plaatsen in MO's geconstrueerd uit AO's hoger ve schil hoger dan de valentieschil</p>
Gedrag van de lagerliggende e-	 $\int \psi_{A,2s}^* \psi_{B,2s} dv \gg \int \psi_{A,1s}^* \psi_{B,1s} dv$ <p>=> slechts klein verschil tussen $E(\text{AO}_{1s})$ en $E(\text{MO}_{1\sigma})$</p> <ul style="list-style-type: none"> • geen bijdrage van lagere schillen tot BO • destabilisatie tgv antibindende MO gevormd uit lagere schillen verwaarloosbaar
Paramagnetische stoffen	<p>Stoffen die sterk door een magneetveld worden aangetrokken.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Wordt bepaald door ongepaarde e- die in de stof aanwezig zijn (door spin gedraagt e- zich als een klein magneetje dat een interactie aan gaat met een uitwendig veld, en zich er naar richt) - Indien stof ongepaard e- bevat => paramagnetisch
Diamagnetische stoffen	<p>Stoffen met slechts een verwaarloosbare interactie met magneetveld</p> <ul style="list-style-type: none"> - Pauliverbod; 2e- in eenzelfde orbitaal met tegengestelde spin - 2 tegengestelde magneetvelden heffen elkaar op - e- paar heeft geen resulterend magnetisch moment en dus geen interactie met uitwendig magnetisch veld
Sigma binding (MO)	<p>p-orbitalen die langs de molecuulas liggen vormen deze binding.</p> 
Pi-binding (MO)	<p>p-orbitalen die loodrecht op de molecuulas staan combineren tot deze bindingen. Aangezien er telkens 2 p-orbitalen loodrecht zijn, worden er telkens 2-bindingen gevormd.</p>  <p>Omdat de 2 loodrechte p-orbitalen vd atomen equivalent zijn, zij de gevormde -orbitalen eveneens equivalent maw zijn ontaard.</p>
AO en MO	<p>Axiale overlap is efficiënter dan de zijdelingse overlap => heeft een lagere E dan , en een hogere E dan</p> <p>Opmerking; de onderlinge energieën vd MO is element-afhankelijk</p> <ul style="list-style-type: none"> ⇒ voor sommige homonucleaire moleculen keren en om in volgorde (oorzaak: 2s -2p interactie) ⇒ de verschuiving is mee het gevolg vd repulsie tussen ve- ⇒ -orbitaal vertoont zijn grootste e- dichtheid in de buurt vd molecuul as (zoals - en -orbitaal). Het -orbitaal zal daarom een repulsie ondervinden van e- in - en -orbitaal. Deze repulsie is veel groter dan de repulsie die de e--orbitalen ondervinden (deze zitten in gebieden waar

	<p>- en -orbitaal een lage e- dichtheid vertonen) en dus komt het -orbitaal te liggen bij een E hoger dan verwacht.</p>
Heteronucleaire diatomische moleculen	 <p>Heteronucleair: $c_A \neq c_B$</p> <p>Relatieve bijdrage van AO; hoe groter het E verschil is tussen de samenstellende AO's, hoe kleiner de interactie-energie is, dwz hoe kleiner de overlappende integraal is.</p> <p>Bv. HF; omdat F meer elektronegatief is dan H, zal het trachten de e- dichter bij zich te houden => E vd ve- van F is lager dan die van H</p> <p>⇒ De bindende MO heeft dus een groter bijdrage van F, terwijl het antibindende MO een grotere bijdrage heeft van H.</p>
Excimeren	Moleculen die slechts stabiel zijn in elektronisch geëxciteerde toestanden. Bv Be ₂ ; moet een e- van het *2s-orbitaal geëxciteerd worden naar het 2p-orbitaal, waardoor de bindingsorde = 1.
HOMO-orbitalen	"Highest Occupied Molecular Orbital"; hoogste MO's die gevuld zijn
LUMO-orbitalen	"Lowest Unoccupied Molecular Orbital"; laagste MO's die niet gevuld zijn. ⇒ Energie verschil tussen de HOMO en de LUMO = <u>HOMO-LUMO energieverschil</u> .
SOMO-orbitalen	"Singly Occupied Molecular Orbital"
HOMO-LUMO theorie	<p>Vooral nuttig voor het verklaren van chemische reactiviteit.</p> <ul style="list-style-type: none"> - De bezette orbitalen van 2 moleculen stoten elkaar af. - + ladingen op de ene molecule trekken – ladingen op de andere molecule aan. - De bezette orbitalen vd ene molecule interageren met de onbezette orbitalen vd andere molecule.
	<p>Stabilisatie van het gevormde product door interactie HOMO en LUMO orbitalen. In het bovenstaande voorbeeld gaan HOMO_A en LUMO_B met elkaar interageren want ΔE_1 is kleiner dan ΔE_2.</p> 
Hoofdstuk 5: Valentiebindingstheorie	
Lewisstructuur	Model waarbij formules van moleculen worden opgesteld die duidelijk weergeven hoe de ve- verdeeld zijn binnen de molecule. Dit houdt meteen in dat orbitalen uit schillen lager of hoger dan de valentieschil niet betrokken zijn bij covalente bindingen.
Lewis-grondregel	Wanneer 2 atomen die zich in elkaars omgeving bevinden hun ve- zo herschikken zodanig dat sommige e- samen gebruikt kunnen worden door de 2 atomen, dan wordt een stabiele molecule gevormd wanneer het samen gebruik leidt tot een volledig gevulde valentieschil voor beide atomen.
Octetregel	Regel die stelt dat atomen streven naar een valentieschil met 8e- (=octet) en zo de edelgasconfiguratie bereiken. Zwaardere elementen: ook d-orbitalen: opvulling mogelijk tot 18 e-

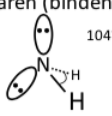
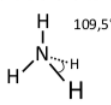
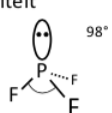
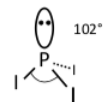
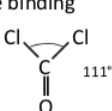
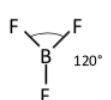







































Coördinatief covalente binding	Binding waarbij beide elektronen door 1 atoom geleverd worden. Bv. NH ₃
Enkele binding	Samengebruiken van 2 elektronenparen in een chemische binding ⇒ Dubbele binding = samen gebruiken van 2 elektronenparen ⇒ Driedubbele binding = gebruiken van 3 ongepaarde e ⁻ van het andere atoom (Bv. N ₂)
Homopolaire binding	De e ⁻ van het bindende paar verblijven een even grote fractie van hun tijd rond ieder van de atomen.
Regels voor het tekenen van Lewisstructuren	<ol style="list-style-type: none"> 1) Bereken het aantal ve⁻ (+ negatieve lading/ - positieve lading) 2) Teken de skeletstructuur vd molecule 3) Verdeel de e⁻ over de atomen die het centrale atoom omringen. Zorg dat de octetregel voldaan is. 4) Verdeel de overblijvende e⁻ paarsgewijs over het centrale atoom (controleer adhv formele lading)
Formele lading	$F = N - V - B/2$ <p> F = formele lading N = # e⁻ in bindende e⁻-paren V = # e⁻ in vrije e⁻-paren B = # valentie-e⁻ neutrale atoom </p> <p>Lading die een atoom heeft in een geïdealiseerde Lewisstructuur. Hypothetisch lading, geen reële lading.</p>
Zuiver ionaire binding	Voor iedere binding kennen we beide e ⁻ toe aan het meest elektronegatieve element. Zo bekomen we voor elk atoom een getal gelegen tussen +7 en -7 = oxidatietrap = oxidatietoestand = <u>oxidatiegetal</u> (wordt aangeduid met Romeinse cijfers; geen reële lading!)
Gedelokaliseerde binding	<p>Als in de molecule slechts 1 dubbele binding aanwezig is, dan zit het elektronenpaar dat aanleiding geeft tot de dubbele binding verspreid over de 2 N-O bindingen (in het nitrietion). We verspreiden 1 bindend elektronenpaar</p> $\left[\begin{array}{c} \text{N} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O} \quad \cdots \quad \text{O} \end{array} \right]^-$ <p>over 2 reeds bestaande bindingen.</p>
Resonantie beschrijving	<p>Om gedelokaliseerde bindingen toch met een Lewisstructuur voor te stellen. (dubbele pijl tussen de verschillende mogelijkheden)</p> <p>De waarschijnlijkheidsverdeling van de dubbele binding is op ieder moment even groot.</p>
Uitzonderingen op octetregel	<ol style="list-style-type: none"> 1) Moleculen met minder dan 8 ve⁻ rond het centrale atoom. 2) moleculen met meer dan 8 ve⁻ rond het centrale atoom. 3) Moleculen met een oneven aantal elektronen (wordt weergegeven door een punt) 
VSEPR-model	Theorie; model dat toelaat de geometrie te voorspellen van moleculen, gebaseerd op het feit dat e ⁻ paren elkaar afstoten.
Pauling	<p>Model gebaseerd op de lokalisatie-gedachte van Lewis maar met een kwantitatieve, kwantummechanische beschrijving vd bindingen.</p> <p>Nadeel: lokalisatie e⁻ is niet nauwkeurig.</p>

VB-theorie	<p>Gebaseerd op het concept dat de chemische binding bestaat uit een overlap van 2 AO's, die hun oorspronkelijke karakter grotendeels behouden <-> MO-theorie. Basis:</p> <ul style="list-style-type: none"> - e- zijn gelokaliseerd in specifieke bindingen - binding vereist orbitaal overlap - per overlappende orbitaal: 1 minstens 2 orbitalen
Bindingscapaciteit	<p>Schaal op basis van de efficiëntie waarmee het orbitaal kan overlappen met orbitalen van andere atomen.</p> <ul style="list-style-type: none"> - S-orbitaal; bindingscapaciteit = 1 - P-orbitaal; bindingscapaciteit = 1,732 - s-s overlap = 1; s-p overlap = 1,73; p-p overlap = 3 -
Hybridisatie	<p>Lineaire combinatie van AO op 1 atoom. De ruimtelijke oriëntatie van de gevormde hybride orbitalen correspondeert met ruimtelijke schikking van ladingswolken rond het atoom in de beschouwde molecule. VSEPR bepaalt welk type hybridisatie nodig is voor het beschrijven van de binding. <u>Pauling</u>:</p> <ul style="list-style-type: none"> - het systeem streeft naar een zo laag mogelijke E - herschikking ve- in nieuwe AO's die een maximale bindingscapaciteit hebben. - Sterkste bindingen vormen zodat molecule max stabiliseert - Nieuwe orbitalen nieuwe golf functies voor ve- door maken van lineaire combinaties vd oorspronkelijke golf functies. <p>$\text{C}^*: [\text{He}] \quad 2s \uparrow \quad 2p \uparrow \uparrow \uparrow$</p>
Hybridisatie sp^3	<p>Combinatie van 1 s en 3 p orbitalen = 4 equivalente hybride orbitalen. (bindingscapaciteit van = 2.0)</p> <ul style="list-style-type: none"> - Enkele binding - Hoekwaarschijnlijkheid = axiaal symmetrisch - Oriëntatie = tetraëder
hybridisatie sp^2	<p>Combinatie van 1s en 2 p orbitalen ter vorming van 3 equivalente hybridisatie. (bindingscapaciteit = 1.99)</p> <ul style="list-style-type: none"> - Dubbele binding mogelijk - hoekwaarschijnlijkheid = axiaal symmetrisch - Oriëntatie = vlakke gelijkzijdige driehoek met overig p-orbitaal loodrecht op het oppervlak 
sp hybridisatie	<p>Combinatie van 1 s en 1 p orbitaal ter vorming van 2 equivalente hybride sp orbitalen. (bindingscapaciteit = 1.932)</p> <ul style="list-style-type: none"> - Drievoudige binding mogelijk - Hoekwaarschijnlijkheid = axiaal symmetrisch - Oriëntatie = lineair met overige p-orbitalen loodrecht op het oppervlak. 
Iso-energetisch	E blijft behouden (na hybridisatie).

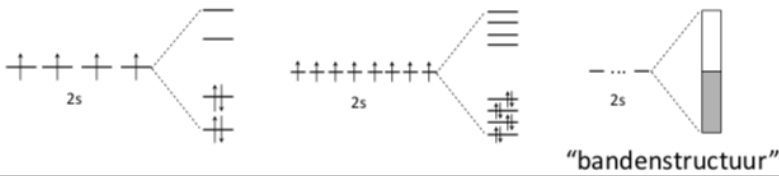
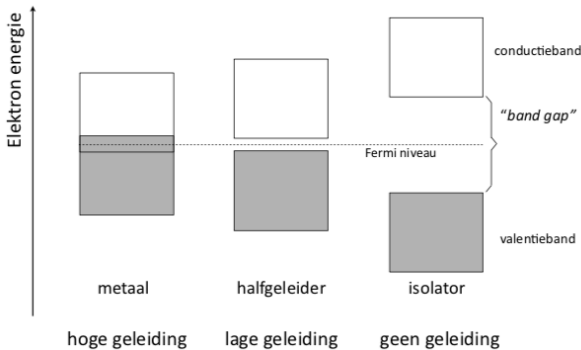
Kritiek op VB-theorie	<p>Bijvoorbeeld CH₄</p> <ul style="list-style-type: none"> - 4 equivalente bindingen - e- gelokaliseerd in de bindingen <p>MO-schema:</p>  <p>4 onbezette antibindende MO</p> <p>4 bezette bindende MO</p> <p>Waarom dan niet 3 gelijke en 1 verschillende binding? Omdat MO orbitalen verdeeld zijn over de hele molecule, en niet op slechts 1 binding betrekking hebben</p> <p>NIET iso-energetisch!!</p> <ul style="list-style-type: none"> - 4 equivalente, iso-energetische bindingen <p>Voor eenvoud lokaliseren we ieder e- in een individuele binding (in VB), omwille vd experimentele symmetrie. ⇒ Ze hebben echter niet allemaal dezelfde E.</p>
Hoofdstuk 6: Kwalitatieve MO/ VB-energieschema's	
MO vs VB	<ul style="list-style-type: none"> - MO; AO's, die horen bij de atomen waaruit de molecule is opgebouwd, gaan volledig verloren bij de vorming vd molecule; er resten enkel nog MO's (lineaire combinatie van AO's en zijn over de hele molecule uitgespreid) - VB; chemische binding wordt opgevat als de essentie gelokaliseerde concentratie van e- tussen 2 atomen, waarbij de golffunctie die de MO beschrijft, opgebouwd is als combinatie van de AO's.
Combinatie MO en VB	<ul style="list-style-type: none"> - VB-theorie voor skeletstructuur (-bindingen) - MO-theorie voor -bindingen en conjugatie
Symmetrisch MO	Orbitaal dat verdeeld zit over de gehele molecule en aan iedere binding een identieke bijdrage tot de elektronendensiteit levert.
sigma-binding (VB)	<p>Beschrijft de enkele binding in een molecule (gebaseerd op het concept van</p>  <p>hybridisatie en lokalisatie van e-)</p>
pi-binding (VB)	<p>Beschrijft de meervoudige bindingen in een molecule.</p> <p>-bindingen zijn reactiever dan -bindingen, omdat</p> <ul style="list-style-type: none"> - gevolg van minder efficiënte zijdelingse overlap - -binding heeft een hogere E dan -bindingen en vereist dus minder E om gebroken te worden. 
MO/ VB schema voor resonantie structuren	<p>Bv. Het carbonaation heeft 3 equivalente Lewisstructuren</p>  <p>$\psi = a\psi_A + b\psi_B + c\psi_C$ $a = b = c$ (want equivalente structuren)</p> <ul style="list-style-type: none"> - C is steeds gehybridiseerd - O eigenlijk iets tussen en

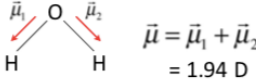
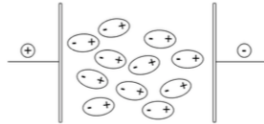
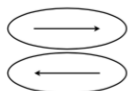
	<p>⇒ We kiezen 2 O-atomen met en 1 met hybridisatie, zonder te specificeren, welke atomen precies. We krijgen dan als resultaat 3 -bindingen en 1 (gedelokaliseerde) -binding.</p> <p>⇒ Slechts 1 orbitaal van C gaat overlappen met O, de 2 anderen zullen overlappen met de rest van de molecule.</p> 
Resonantie-energie	Het verschil in energie tussen deze resonantiestructuren en de werkelijke energie.
Geconjugeerd systeem	Structuur waarin enkele en dubbele bindingen elkaar afwisselen, en waarbij de p-orbitalen die de dubbele bindingen vormen ook met elkaar interageren overheen de tussenliggende enkele binding.
Hoofdstuk 7: Bindingen en bindingkarakteristieken	
Homopolaire covalente binding	<p>Covalente binding tussen 2 identieke atomen waarbij het e- v.h ene atoom even graag verblijft op het andere, en omgekeerd. Gemiddeld spenderen ze even veel tijd rond het ene atoom als rond het andere.</p> <p>⇒ Symmetrische verdeling; omdat E van de AO's die de MO vormen zijn identiek. = symmetrische elektronenverdeling</p>
Polaire binding	<p>Bij een covalente tussen 2 ongelijke atomen, zal het zelden voorkomen dat de 2 AO's die de MO vormen dezelfde E hebben.</p>  <p>Bijvoorbeeld HCl; de e- zitten altijd een groter deel van hun tijd bij Cl dan bij H. (H +, Cl -). E(</p> <p>⇒ Asymmetrische ladingsverdeling.</p>
Elektronegativiteit	<p>Van een element is de mate waarin een atoom van dat element de neiging vertoont om bindende e- naar zich toe te trekken.</p> <p>1) <u>Mulliken EN</u> = soort van balans (e- afstaan langs de ene kant maar ook e- krijgen) gemiddelde van de 2 EN.</p> <p>2) <u>Pauling EN</u> = gaat uit van de bindingsenergie van een molecule wanneer we 2 atomen combineren. Hoe sterk is de moleculaire binding? Bereken het ΔE van de bindingen.</p> <p>3) <u>Allred & Rochow</u> = gebaseerd op de effectieve kernlading, omdat sommige bindingen geen homopolaire bindingen heeft (waarvoor 2 en 1 niet zouden werken).</p>
Bindingsorde	<p>Aantal bindende e- paren die door de 2 atomen gedeeld worden.</p> $= \frac{\text{aantal bindende e}^- \text{ paren tussen X en Y}}{\text{aantal bindingen}}$ <p>Niet-gehele bindingsorden komen voor bij gedelokaliseerde bindingen</p>

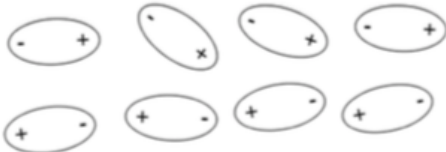
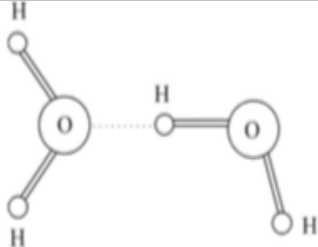
Bindingslengte	<p>Voor ieder type binding: karakteristieke bindingslengte = som van covalentstralen. (sterke correlatie tussen BL en BO)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Alle moleculen vd dezelfde soort komt eenzelfde binding voor met identieke bindingslente 2) In onderscheiden moleculen, tussen atoom A en B is een chemische binding met dezelfde bindingsorde aanwezig, dan zijn de bindingslengten nagenoeg identiek
Bindingsenergie	<p>De bindingsenergie van een binding A-B is de gemiddelde reactie-enthalpie ΔH die nodig is voor het verbreken van binding A-B in de gasfase. (sterke correlatie tussen BE en BO)</p> <p>= maat voor sterkte vd binding (hoe hoger bindingsenergie, hoe sterker de binding).</p> <p>- De bindingsenergie neemt toe met het aantal bindingen tussen 2 elementen.</p> <div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="margin-right: 20px;"> $\text{C} - \text{C}$ $\text{C} = \text{C}$ $\text{C} \equiv \text{C}$ </div> <div style="margin-right: 20px;"> 347 kJ/mol 611 kJ/mol 837 kJ/mol </div> <div style="font-size: 2em; line-height: 1;"> $\left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\}$ </div> <div style="margin-left: 10px;"> x 1,76 x 2,41 </div> </div>
Bindingsdissociatie-energie	E die moet toegevoegd worden aan een molecule om de beschouwde binding te verbreken = dissociatie-energie.
Reactie-enthalpie	De vrijgekomen of opgenomen warmte wanneer deze reacties bij constante druk verlopen. ΔH
Overzicht molecule beschrijvingen	<ul style="list-style-type: none"> • Kwantummechanica: analytische oplossing slechts voor aller-eenvoudigste moleculen • MO-theorie: gebaseerd op LCAO benadering; correcte beschrijving maar nog steeds zeer complex • Lewis structuren: eenvoudig model dat toelaat e^- te verdelen over de molecule, dat echter weinig inzicht geeft in de aard van de binding en de e^- (foutievelijk) localiseert in 1 binding of op 1 atoom • Valentiebindings theorie: model dat bindingen in vele moleculen kan rationaliseren adhv het voorkomen van hybride orbitalen
Hoofdstuk 8: Het VSEPR-model	
Molecuul-geometrie	Driedimensionale verdeling van de atomen in een molecule = molecuulstructuur
Bindingshoek	De hoek tussen de lijnen die telkens de kernen van 2 met elkaar gebonden atomen verbinden, in een groep van 3 opeenvolgende atomen.
VSEPR-model	<p>"<i>Valence Shell Electron Pair Repulsion</i>" = eenvoudig model om moleculaire geometrie kwalitatief te voorspellen, gebaseerd op onderlinge afstoting door elektronen.</p> <p>⇒ Bindingen en vrije e^- paren trachten zich zo ver mogelijk van elkaar te bevinden, om zo het systeem max te stabiliseren.</p>
Algemene regel	<p>Afstoting-volgorde op eenzelfde atoom:</p> <p>$VP : VP > VP : BP > BP : BP$</p>
EN substituent	<p>Zuigt het bindend elektronenpaar naar zich toe, en verwijdert daarom de elektronendichtheid uit de buurt vh centrale atoom.</p> <p>⇒ Bindingen met sterk EN substituenten oefenen minder repulsie uit op de andere concentratie gebieden;</p> <p><u>De regel van Bent</u></p>
Sterische hindering	Afstoting chemische bindingen (= elektronenconcentraties) tegenoverliggende centrale atomen.

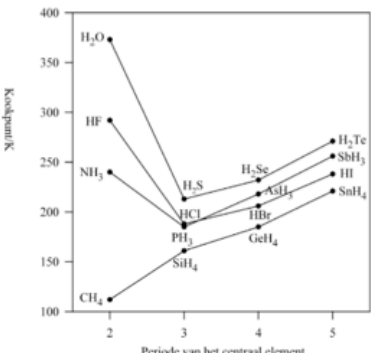
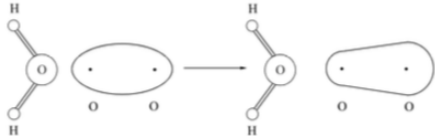
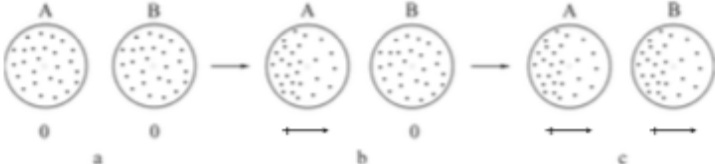
Secundaire effecten	<p>Een vrij e- paar veroorzaakt een grotere repulsie dan bindend e- paar</p> <p>Secundaire effecten</p> <p>1. Aard van de elektronenparen (bindend of vrij)</p> <div></div> <p>2. Verschil in elektronegativiteit</p> <div></div> <p>3. Verschil in volume van de binding</p> <div></div> <p>F is minder EN dan I en dus I trekt de e- harder naar zich toe waardoor de hoek groter is.</p> <p>De hoek is kleiner omdat de dubbele binding zwaarder is</p>																																				
Sferische hindering	<p>Afstoting van de tegenoverliggende centrale atomen (bij moleculen met meer dan 1 centraal atoom).</p> <ul style="list-style-type: none">- Wanneer 2 fragmenten ten overstaan van elkaar kunnen roteren bereiken ze hun minimale pot. E voor de positie waarvoor hun sferische hindering minimaal is.- De rotatie rond een meervoudige binding vergt veel meer E dan wat de minimalisatie vd sferische hindering oplevert.																																				
Overzicht VSEPR	<table><tr><th>$i+j$</th><th>$j=0$</th><th>$j=1$</th><th>$j=2$</th><th>$j=3$</th><th></th></tr><tr><td>2</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>BeF₂</td></tr><tr><td>3</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>BF₃ GeF₂</td></tr><tr><td>4</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>CF₄ H₂O</td></tr><tr><td>5</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>PF₅ XeF₂</td></tr><tr><td>6</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>SF₆ XeF₄ AlF₆³⁻</td></tr></table>	$i+j$	$j=0$	$j=1$	$j=2$	$j=3$		2					BeF ₂	3					BF ₃ GeF ₂	4					CF ₄ H ₂ O	5					PF ₅ XeF ₂	6					SF ₆ XeF ₄ AlF ₆ ³⁻
$i+j$	$j=0$	$j=1$	$j=2$	$j=3$																																	
2					BeF ₂																																
3					BF ₃ GeF ₂																																
4					CF ₄ H ₂ O																																
5					PF ₅ XeF ₂																																
6					SF ₆ XeF ₄ AlF ₆ ³⁻																																
Hoofdstuk 9: De ionaire binding en de metaalbinding																																					
Ionaire binding	<p>Volledige elektronenoverdracht om zo edelgasconfiguratie te bereiken. (vorming van ionen)</p> <p>Van elektrostatische aard.</p>																																				
Elektronen-affiniteit van Cl	<p>De elektronenaffiniteit van Cl is een negatief getal, dit wijst op het feit dat wanneer het Cl-atoom een ion opneemt er een stabilisatie vh systeem plaatsvindt en dus een lagere E.</p>																																				
IP van natrium	<p>Positieve IP van natrium wijst er op dat voor de ionisatie E aan het systeem moet toegevoegd worden. De “eindtoestand” heeft dan een hogere E dan de “begintoestand” van de reactie.</p>																																				
Coulomb-interactie (ionen)	<p>Het IP en elektronenaffiniteit zeggen alleen iets over de aparte (geïsoleerde ionen) en dus niet over hun onderlinge interacties.</p> <p>⇒ Coulomb-interactie = formule waarbij r de afstand is tussen beide ionen. (attractie)</p> <p>⇒ Vereenvoudiging van de reële reactie; 3^e stap moet rekening gehouden worden met het feit dat in de evenwichtspositie de ionen niet allen de Coulomb-attractie maar ook repulsieve krachten ondervinden => <i>Coulomb- en Pauli-afstoting</i></p>																																				
Kation	Positief ion																																				
Anion	Negatief ion																																				

Born-Habercycli	Cyclus die bestaat uit een reeks opeenvolgende reacties, om reactie-enthalpieën te kunnen analyseren, en heeft betrekking op de vorming van ionaire verbinding uit de reactie van metaal met een niet-metaal. (toepassing van de wet van Hess)	
Roosterentalpie	<p>Enthalpieverandering die optreedt bij de vorming van een ionaire verbinding uit de samenstellende gasvormige ionen. De negatieve ΔE wijst op een stabilisatie van het systeem en suggereert dat NaCl van zuivere elektrostatische aard is.</p> <p>F die de atomen bijeenhoudt is de elektrische aantrekkingskracht tussen positief en negatief geladen ionen.</p>	
Monoatomische ionen	Alkalimetalen (Na, Li, K, Rb, Cs) groep IA: afgeven van 1e- Aardalkalimetalen (Be, Mg, Ca, Sr, Ba) groep IIA: afgeven van 2e- ⇒ Lage ionisatiepotentiaal	
Negatieve monoatomaire ionen	Chalcogenen (O, S, Se, Te, Po, Uuh) groep VIA: opname van 2e- Halogenen (F, Cl, Br, I, At) Groep VIIA: opname 1e- ⇒ Hoge elektronenaffiniteit (nemen graag e- op)	
Transitiemetalen	Speciaal geval; Bv. Voor een reeks transitiemetalen hebben de 3d-orbitalen een hogere E dan de 4s-orbitalen, hierdoor bij de vorming van een kation veranderen de relatieve E . De grondtoestand van het ontstane kation bevat niet een e- minder in het 3d-orbitaal maar in het 4s-orbitaal. ⇒ Soms komen ook driewaardige kationen voor zoals bij ; de relatief lage 3 ^e IP komt doordat de 3 ^e ionisatie een e- weghaalt uit een dubbel bezet 3d-orbitaal; het 6 ^e 3d-e- zit in een bezet orbitaal en ondervindt dus een sterkere inter-e- afstoting dan de andere 3d-e- => hogere E en dus makkelijker te verwijderen.	
Elektronenwolk-model	Kenmerken: 1) Metaalatomen: gerangschikt in dichtgestapeld rooster, waarin elk atoom 1 of meer e- verliest gevormde metaalionen = atoomharten. 2) e- bewegen zich vrij binnen de grenzen van metaal. 3) e- worden binnen het metaal gehouden adhv Coulomb krachten, uitgaande van atoomharten. Deze worden bijgehouden door elektrostatische aantrekking van beweeglijke e- tussen hen in (= "elektronenlijm")	
Metaalbinding	Het delen van elektronen doorheen het hele kristal	
Metallische eigenschappen	<ol style="list-style-type: none"> 1) <u>Metaalglans</u>: door EM straling van zichtbare , opp e- trillen met van invallende straling opp e- versneld dus moeten EM-straling afgeven met zelfde als invallende straling. We zien dus uitgezonden straling als terugkaatsing van invallende lichtstraal. 2) <u>Zachtheid en vervormbaarheid</u>; positieve kernen in zee e- druk buigen 3) <u>Elektrische geleidbaarheid</u>; e- zijn "vrij" en kunnen makkelijk bewegen => hoog ladingstransport, hoge geleidbaarheid. 	
Elektronen-gasmodel	Elektronen vormen een soort "gas", zodat hun mobiliteit (en dus de geleidbaarheid) zou moeten stijgen bij stijgende T . ⇒ Experimenteel: omgekeerde! Elektronengasmodel niet helemaal correct door te sterke vereenvoudiging.	

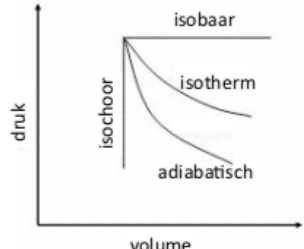
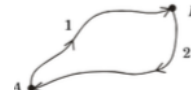
Energiebanden	<p>Wanneer een zeer groot aantal atomen combineren, wordt het aantal MO's zeer groot met onderling zeer kleine verschillen in E. \Rightarrow Energieniveaus in een vaste stof zijn dan eerder banden.</p>  <p style="text-align: right;">"bandenstructuur"</p>
Valentieband	Gevormd door de bindende orbitalen (die bezet wordt door ve^-)
Conductieband	Gevormd door de antibindende orbitalen.
Geleidbaarheid	 <p>Geleiders: indien overlap of raken, e^- kunnen naar conductieband overspringen. T° stijgt, geleidbaarheid daalt \Rightarrow ionen trillen meer, dus beletten ze de doorgang van e^-</p> <p>Halfgeleiders: ΔE is niet groot dus sommige e^- kunnen wel de conductieband bereiken; als T° stijgt dan stijgt de geleidbaarheid, omdat bij hogere T° meer e^- de conductieband bereiken.</p> <p>metaal halfgeleider isolator</p> <p>hoge geleiding lage geleiding geen geleiding</p>
Intrinsieke halfgeleider	Bevat evenveel e^- in de valentieband als in de conductieband. De geleidbaarheid is een intrinsieke eigenschap zelf. De geleidbaarheid wordt bepaald door het ΔE tussen de valentie- en conductieband.
Doteren	Geleidbaarheid aanpassen dmv doteren = inbrengen van andere atomen in de zuivere stof.
Extrensieke halfgeleider	<p>Verschillend aantal e^- in de conductieband en gaten in de valentieband. De ingebrachte atomen brengen dus extra ladingdragers. (typisch voorbeeld van doteren)</p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>p type</i> halfgeleider; als de ladingdragers positief zijn - <i>n type</i> halfgeleider; als de ladingdragers negatief zijn
<i>pn</i> -junctie	<p>Wanneer een <i>p type</i> halfgeleider in contact wordt gebracht met een <i>n type</i> halfgeleider.</p> <ul style="list-style-type: none"> - "<i>forward bias</i>" = wanneer aan de <i>p</i> zijde een + spanning wordt aangelegd tegenover de <i>n</i> zijde \Rightarrow er kan stroom vloeien \Rightarrow constructie gedraagt zich als geleider - "<i>reverse bias</i>" = spanning wordt omgekeerd aangelegd \Rightarrow er kan geen stroom vloeien \Rightarrow isolator <p>\Rightarrow Geleidingsverschil aanleggen door dotering en het aanleggen van een potentiaalverschil.</p>
Hoofdstuk 10: Intermoleculaire krachten	
Intermoleculaire krachten	<p>Krachten die zorgen voor een interactie tussen moleculen onderling (veel zwakker dan krachten tussen atomen). Hangt sterk af van de afstand tussen de moleculen (grote afstanden: attractief/ korte afstanden: repulsief)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Oppervlaktespanning = sferische vorm 2) Cohesie = krachten tussen gelijke moleculen (vloeistof) 3) Adhesie = krachten tussen verschillende moleculen.

Van der Waals-interacties	Dipool-dipool; dipool-geïnduceerde dipool; geïnduceerde dipool-geïnduceerde dipool interacties.	
	Interactie type	Interactie-energie (kJ/mol)
	Ion-dipool	40 - 600
	Dipool -dipool	5 - 25
	Dipool – geïnduceerde dipool	2 - 10
	Geïnduceerde dipool – geïnduceerde dipool	0,05 - 40
Multipool-expansie	Wiskundige reeks waarin de eerste term de elektrische monopool weergeeft. De tweede term is de dipoolterm, de derde term is de quadrupoolterm enz. voor neutrale elementen is de monopool = 0.	
Dipoolmoment	<p>Van een polyatomische molecule kan beschreven worden als de vectorsom van zogenaamde bindingsmomenten (=dipoolmomenten die geassocieerd kunnen worden met de polaire bindingen).</p> <p style="text-align: center;"> $\delta^+ \text{H} \xrightarrow{\text{red arrow}} \text{Cl} \delta^-$ elektrische dipool </p> <ul style="list-style-type: none"> - Elektrisch dipoolmoment geeft de oriëntatie vd dipool aan. - (met r = de vector gericht van negatieve naar positieve lading = bindingslengte) 	
Dipoolmoment van water	 <p>$\vec{\mu} = \vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2$ = 1.94 D</p>	vectorsom vd dipoolmomenten, geassocieerd met de polaire bindingen van de molecule. Het dipoolmoment is verschillend van 0.
Dipoolmoment van CO ₂	<p>$\text{O}=\text{C}=\text{O}$</p> <p>$\vec{\mu} = 0$</p> <p>⇒ Toont aan dat sommige symmetrische moleculen dan wel uit polaire bindingen mogen bestaan, maar niet noodzakelijk een dipoolmoment vertonen.</p>	<p>de C-O bindingen zijn ook polair, omdat O veel elektronegatiever is dan C, dus bindingsmoment.</p> <p>2 bindingsmoment zijn even groot (beide bindingen zijn perfect equivalent), dipoolmoment = 0</p>
Moleculen als dipolen	 <p>Dipolen in een elektrisch veld: oplijning tgv. extern veld niet perfect wegens thermische beweging</p>  <p>Dipool - dipool interactie: dipool => elektrisch veld => beïnvloedt andere moleculen / dipolen => wisselwerking zorgt voor richtende kracht</p>	moleculaire dipolen komen nagenoeg evenwijdig naast elkaar te liggen.
Dipool-dipool	Als beide moleculen dipool zijn dan zullen ze door wisselwerking een richtende kracht ondervinden (krachten die dipolen op elkaar uitoefenen).	
Ion-dipool	<p>Ionen creëren sterk elektrisch veld die gaan interageren met dipolen van bv. H₂O => richtend effect van ionen.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Ion negatief: H₂O zal + kant naar ion richten - Ion positief: H₂O zal – kant naar ion richten. 	
Hydratatie	<p>Door het sterk elektrisch veld rond ionen, zullen er sterke Coulomb krachten optreden tussen ionen en watermoleculen (de dichtstbijzijnde moleculen van water zullen zich permanent hechten aan de ionen).</p>	

Hydratatie-energie	<p>Door hydratatie neemt de translatie E af: hydratatie gaat gepaard met een E vermindering en dus stabilisatie v.h. systeem.</p> <p>Bv. $\text{Na}^+(\text{g}) + x \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \longrightarrow [\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_x]^+(\text{aq}) + 397 \text{ kJ}$</p> <ul style="list-style-type: none"> - Uitgangstoestand = geïsoleerde natrium ionen en geïsoleerde H₂O moleculen - Eindtoestand = gehydrateerd natriumionen in een waterige oplossing - Bij dit proces komt ongeveer 400 kJ aan E vrij, wat overeenkomt met die van een covalente binding
Oppervlaktelading en hydratatie	<p>Aantal H₂O moleculen rond een ion is afhankelijk van de straal v.h. ion</p> <ul style="list-style-type: none"> - Meestal vormen de H₂O 1 hydratatielaag rond het ion dus hoe groter het oppervlak hoe meer H₂O moleculen <p>⇒ MAAR, hoe groter het oppervlak hoe lager de oppervlakte-lading dus zullen H₂O moleculen minder sterk binden (# gebonden H₂O zal niet toenemen met het kwadraat v.d. r)</p> <ul style="list-style-type: none"> - Voor hooggeladen ionen is het elektrisch veld zo sterk dat H₂O moleculen ook een 2^e hydratatielaag kunnen vormen.
Dipool-dipool interactie = Keesom interactie	<p>Dipool (2 gescheiden ladingen) moleculaire dipolen creëren elektrisch veld in hun omgeving beïnvloedt andere moleculen in hun buurt. Wanneer andere dipool in dit veld wordt gebracht dan ondervinden beide door hun wisselwerking een richtende kracht.</p>  <p>veel minder permanent dan hydratatie door het zwakkere elektrisch veld!</p> <ul style="list-style-type: none"> - Thermische beweging verhindert perfecte alignatie - Netto resultaat: continue vorming en verbreking van dipool-dipool interacties.
Condensatie-warmte	<p>E die vrijkomt wanneer de ver van elkaar verwijderde dipolaire moleculen naar elkaar toegebracht worden, waardoor ze met elkaar in interactie treden, en hun E minimaliseer door zich zo veel mogelijk naar elkaar te richten.</p>
Verdampings-warmte	<p>E die moet toegevoegd worden om vloeibaar chloroform te verdampen (= interactie E die moet overwonnen worden om de individuele dipolen uit elkaars intersfeer te verwijderen).</p>
Waterstofbrug	 <p>O vertoont 2 vrije e- paren (dus e- rijk) <-> H is zeer e- arm en kan daarom diep doordringen in het gebied v.d. diffuse vrije e- paren van O resultaat: stabilisatie is groter dan verwacht op basis van dipool-dipoolinteractie. Interactie is zo sterk (vergeleken met een chemische binding)</p>

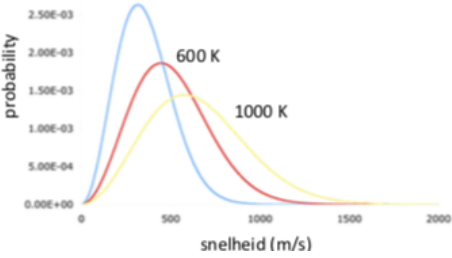
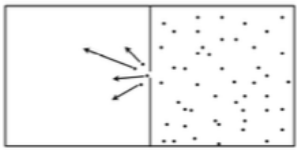
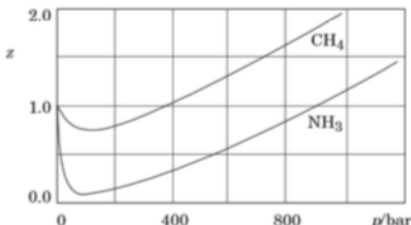
<p>Kookpunten</p>	<p>Wanneer er waterstofbruggen aanwezig zijn, moet er extra veel E toegevoegd worden om de vloeistof te laten verdampen (hoge kookpunten)</p>  <p>toenemende abscis afnemende EN toenemende massa centrale element</p> <p>CH₄ en SnH₄ zijn de centrale elementen weinig EN kookpunt neemt toe met stijgende massa</p> <p>HF, H₂O en NH₃ vertonen afwijking op deze regel waterstofbruggen zorgen inderdaad voor een grotere stabilisatie</p>
<p>Polariseerbaarheid</p>	 <p>Mate waarin de elektronenwolk vervormd kan worden door een elektrisch veld.</p> <p>- e- dicht bij de kern: lage polariseerbaarheid</p> <ul style="list-style-type: none"> - e- ver van de kern: hoge polariseerbaarheid - molecule zoals I₂ zal dus een hogere polariseerbaarheid vertonen dan H₂
<p>Geïnduceerde dipool</p>	<p>Molecule die wordt gepolariseerd (zie tekening hierboven). De zwaartepunten van de + en – lading vallen niet langer samen. = <i>Debye interacties</i></p>
<p>Gl dipool-Gl dipool interactie</p>	 <p>Interactie tussen niet-polaire atomen door de vorming van momentane dipoolmomenten. Gemiddeld zwak aantrekkende krachten</p> <p>Kwantummechanisch; atomen vertonen een sferisch symmetrische e- verdeling, wat niet wilt zeggen dat op ieder ogenblik de ladingsverdeling symmetrisch moet zijn. e- kunnen zich op een ogenblik aan 1 zijde vd kern bevinden zwaartepunten van – en + lading van dat atoom vallen niet meer samen dipoolmoment induceert een dipoolmoment in het andere atoom.</p>
<p>London-dispersie krachten</p>	<p>De aantrekkende krachten die de apolaire moleculen ten gevolge van deze interacties ondervinden. (Bv. Kookpunt van alkanen neemt toe met grootte van moleculen)</p>

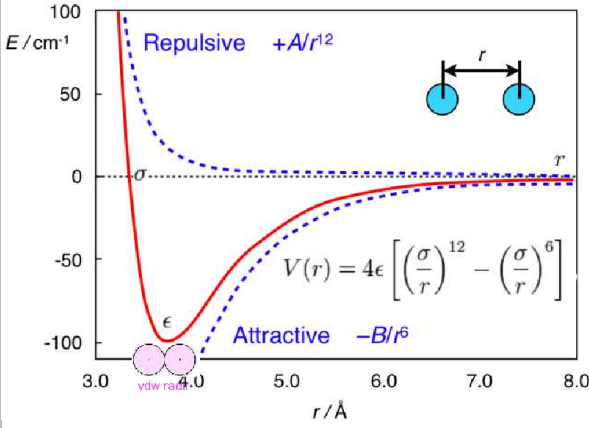
DEEL II: CHEMISCHE THERMODYNAMICA

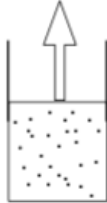
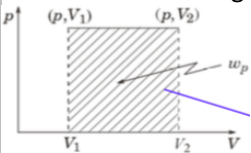
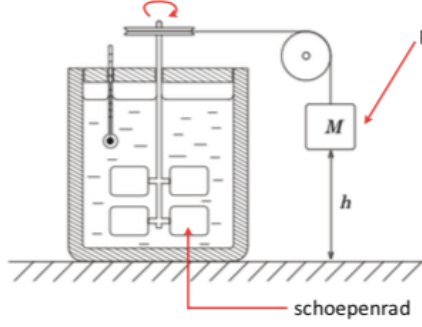
Hoofdstuk 11: Inleidende begrippen uit de thermodynamica	
Thermodynamisch systeem	Een deel vh universum dat op, arbitraire wijze, door welbepaalde grenzen, ingegeven door de doelstellingen vh experiment, vd rest vh universum afgezonderd wordt.
Open systeem	Kan zowel E als materie uitwisselen met de omgeving
Gesloten systeem	Kan met zijn omgeving E, maar geen materie uitwisselen.
Geïsoleerd systeem	Kan noch materie noch E uitwisselen met de omgeving.
Thermodynamische eigenschappen	Grootheden die nodig zijn om een systeem te beschrijven. Als alle eigenschappen vh systeem volledig gespecificeerd zijn dan is de toestand vh systeem gekend. (= toestandsvariabelen)
Extensieve variabelen	Grootheden waarvan de waarde afhangt vd uitgebreidheid vh systeem.
Intensieve variabelen	Grootheden die niet afhangen vd uitgebreidheid vh systeem, en dus welbepaalde waarden hebben in ieder klein gebied vh systeem.
Thermodynamisch evenwicht	Een systeem heeft een thermodynamisch evenwicht bereikt als het in functie van de tijd geen neiging tot veranderen vertoont. 3 voorwaarden; i) Thermisch evenwicht; temperatuur is dezelfde in alle delen vh systeem ii) Mechanisch evenwicht; geen macroscopische beweging binnen het systeem zelf en met omgeving. iii) Chemisch evenwicht; samenstelling vh systeem blijft onveranderd in functie van de tijd.
Isotherm proces	Temperatuur in het systeem is constant.
Isobaar proces	Druk in het systeem is constant.
Isochoor proces	Volume van het systeem is constant.
Adiabatisch proces	Proces in een systeem, afgesloten vd omgeving met thermisch ondoordringbare wanden geen warmte (wel E bv. Arbeid) uitwisseling met de omgeving thermische isolatie. 
Kringproces	Bij het beëindigen van het proces hebben alle eigenschappen van het systeem dezelfde waarde als bij de aanvang ervan. 
Toestandsfunctie	Alle toestandsvariabelen (p, V en T) waarvoor de waarde na het kringproces hetzelfde is als ervoor. $\text{Verandering van } Y = \int_{\text{begin}}^{\text{einde}} dY$ totale verandering die toestandsvariabele Y ondergaat infinitesimale verandering in Y Elk proces is een opeenvolging van kleine stapjes die limiet infinitesimaal groot zijn.
Totale differentiaal	2 eigenschappen: 1) Stel Y (dan kan dY geschreven worden als $dY = \sum_{i=1}^n \frac{\partial Y}{\partial x_i} dx_i$

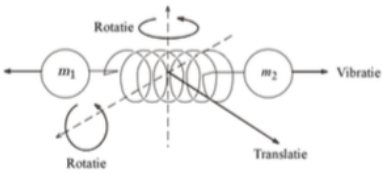
	<p>2) De bepaalde integraal ve totale differentiaal kan geschreven mbv de functiewaarden in de aangegeven boven- en ondergrens</p> $\int_{\text{begin}}^{\text{einde}} dY = Y_{\text{einde}} - Y_{\text{begin}} = \Delta Y$ <p>ΔY is onafhankelijk van de gevolgde weg!</p>
Spontaan proces	Proces dat verloopt zonder tussenkomst van buitenaf. In een spontaan proces is het systeem niet in evenwicht, behalve in begin- en eindtoestand. Ten gevolge van dit onevenwicht evolueert het systeem vanuit het oorspronkelijke evenwicht in de richting vh nieuwe evenwicht.
Reversibel proces	<p>Een proces verloopt reversibel wanneer het systeem een continue reeks evenwichtstoestanden doorloopt en voortdurend in evenwicht is met zijn omgeving.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Vervang continue expansie door stapsgewijze expansie: - Doorlopen ve oneindige reeks infinitesemale p verlagingen - Na iedere p verlaging wachten tot systeem terug in evenwicht is <p>⇒ Proces wordt dan ononderscheidbaar van reversibel proces</p> <p>⇒ Duurt oneindig lag, en is dus experimenteel onuitvoerbaar</p>
Quasistatisch proces	Proces waarbij het systeem een continue reeks evenwichtstoestanden doorloopt. Evenwicht met de omgeving is niet vereist.
Irreversibel proces	<p>Ieder proces dat niet reversibel verloopt. => alle spontane processen zijn irreversibel. 3 soorten;;</p> <ul style="list-style-type: none"> i) Geen intern en geen extern evenwicht ii) Wel intern, maar geen extern evenwicht iii) Geen intern, maar wel extern evenwicht
Hoofdstuk 12: Eigenschappen van gassen	
Druk van het gas	<p>De kracht die het gas uitoefent op een eenheid van oppervlakte vd wanden vd kamer waarin het opgesloten is.</p> $p = \frac{mg}{A} = \frac{\rho Vg}{A} = \frac{\rho Ahg}{A} = \rho hg$
Nulde hoofdwet	Wanneer een systeem A in thermisch evenwicht is met een systeem B, en wanneer een systeem B in thermisch evenwicht is met een systeem C, dan is A in thermisch evenwicht met C.
Temperatuur	Eigenschap van materie, die onafhankelijk is vd aard en vd hoeveelheid materie, en waarmee we kunnen uitdrukken of 2 beschouwde lichamen al dan niet in thermisch evenwicht zijn.
Celsiuschaal	Temperatuur van smeltend en kokend water waaraan de waarden 0 en 100 toegekend werden.
Wet van Boyle	<p>Voor eenzelfde hoeveelheid gas is bij een constante temperatuur het volume omgekeerd evenredig met de druk.</p> <p>$pV = Cte$ (hoeveelheid gas en temperatuur zijn constant)</p>
Kelvinschaal	Ideale gassen temperatuurschaal; $T = 273,15 + t$. ($t = ^\circ C$)
Wet van Charles	<p>Het volume van een gegeven hoeveelheid gas is bij constante druk recht evenredig met de Kelvintemperatuur.</p> $V = \alpha_0 V_0 T$
Wet van Amontons	<p>Bij eenzelfde hoeveelheid gas en constant volume zijn druk en Kelvintemperatuur recht evenredig.</p> <p>$p = cte \cdot T$</p>
Ideale gas	Hypothetische gas dat over het hele druk- en temperatuurinterval wel aan de wetten van Boyle en Charles (die slechts een benaderende beschrijving van een gas bieden) voldoet.
Gecombineerde gaswet	Combinatie van de wetten van Charles, Boyle en Amontons: waarbij C = constante

Wet van Avogadro	Gelijke volumes van verschillende gassen bevatten bij gelijke temperatuur en druk eenzelfde aantal moleculen. $V = cte \cdot n$
Mol	Eén mol stof is de hoeveelheid van die stof die evenveel elementaire entiteiten bevat als er atomen zijn in 0,012kg van het koolstofisotoop ^{12}C .
Molair volume	Bij STP (273.15 K en 1000 hPa) is het volume V_m ingenomen door 1 mol ideaal gas gelijk aan $22.711 \times 10^{-3} \text{ m}^3 = 22.711 \text{ L}$
Ideale gaswet	$pV = nRT$ (waarbij R = gasconstante)
Wet van Dalton	De totale druk uitgeoefend door een gasmengsel is de som van de drukken die ieder vd samenstellende gassen zou uitoefenen indien het alleen in het beschouwde volume aanwezig was. $p = \left(\sum_i p_i \right) \quad p_i = x_i p$
Kinetische gastheorie	Wiskundige beschrijving vd microscopische processen van gassen. 5 Postulaten; <ul style="list-style-type: none"> i) Gassen zijn samengesteld uit moleculen waarvan de afmetingen verwaarloosbaar klein zijn in vergelijking met de gemiddelde afstand tussen moleculen. ii) De moleculen ve gas bewegen voortduren in alle richtingen en vertonen hierbij uiteenlopende snelheden. iii) De wisselwerkingen tussen de moleculen ve gas zijn verwaarloosbaar zwak, tenzij op het ogenblik ve botsing. iv) De botsingen tussen moleculen onderling, en tussen moleculen en de wand vd kamer waarin het gas opgesloten zit, zijn elastisch. v) De gemiddelde kinetische E ve molecule ve gas is recht evenredig met de absolute T vh gas.
Interpretatie vd gaswetten	Uit postulaat 2 volgt dat moleculen ve gas voortdurend botsen met de wanden vd kamer, waarbij door postulaat 4 de K vd botsende moleculen behouden blijft. <ul style="list-style-type: none"> ⇒ Door de botsing met de wand verandert de impuls vd molecule van richting ⇒ Er wordt een kracht uitgeoefend op de wanden: ⇒ Deze kracht is niets ander dan de druk die door het gas wordt uitgeoefend. 2 factoren bepalen de druk; <ul style="list-style-type: none"> - Botsingfrequentie $f(T, \text{concentratie})$ - Grootte van de impulsverandering $= f(T)$
Evenredigheids-constante	Of de <i>constante van Boltzmann</i> is gelijk aan de ideale gasconstante gedeeld door het aantal atomen of moleculen in 1 mol gas.
Vrijheidsgraad	Ieder van de onafhankelijke bewegingsmogelijkheden voor de moleculen.


<p>Snelheidsverdeling van Maxwell</p>	$dn = 4\pi N \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} v^2 e^{-(mv^2/2kT)} dv$ <p>aantal moleculen dn op een totaal van N moleculen, die, bij temperatuur T, een snelheid hebben gelegen tussen v en $v+dv$</p> $F(v) = \frac{1}{N} \frac{dn}{dv} = 4\pi \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} v^2 e^{-(mv^2/2kT)}$ <p>waarschijnlijkheidsverdeling; geeft aan welke de waarschijnlijkheid is dat een molecuul een snelheid heeft die gelegen is tussen v en $v+dv$</p>  <p>Uit het model van Bernoulli kennen we de gemiddelde kwadratische snelheid vd moleculen. Maar welke verdeling vd snelheid? Asymmetrische curve; hoe smaller de grafiek hoe minder moleculen met een hoge snelheid</p> <p>snelheid De plaats v_h max hangt af vd T° Snelheden zijn zeer hoog</p>
<p>Belang van de snelheidsverdeling</p>	<ul style="list-style-type: none"> - We worden voortdurend gebombardeerd door moleculen met een hoge snelheid, en toch voelen we die niet, omdat de massa's vd deeltjes zo klein zijn. - Waterplassen verdwijnen zelfs al is het 2°C, de moleculen zitten in de vloeistoffase en die zitten daar goed, maar een paar atomen aan het opp hebben een veel grotere snelheid waardoor die naar de gasfase gaan, distributie verandert distributie wordt hersteld door andere moleculen er opnieuw snellere moleculen die gaan ontsnappen enzovoort tot er geen moleculen meer zijn.
<p>Effusie</p>	<p>Het proces waarbij een gas uit een kamer naar de geëvacueerde ruimte stroomt doorheen 1 of meerdere kleine gaatjes.</p> 
<p>Effusiewet van Graham</p>	<p>De effusiesnelheid is omgekeerd evenredig met de vierkantswortel uit de dichtheid van het gas en dus met de massa van de moleculen.</p> $\frac{\text{effusiesnelheid gas 1}}{\text{effusiesnelheid gas 2}} = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}$
<p>Diffusie</p>	<p>Het proces waarbij 2 gassen, wanneer ze met elkaar in contact gebracht worden, spontaan met elkaar zullen mengen zonder hulp van buitenaf (zoals roeren).</p>
<p>Compressiefactor</p>	<p>Compressiefactor z is een functie van druk en temperatuur</p>  <p>p "laag": $V_{\text{reel}} < V_{\text{ideaal gas}}$ oorzaak: onderlinge aantrekking</p> <p>p "groot": $V_{\text{reel}} > V_{\text{ideaal gas}}$ oorzaak: moleculen nemen niet-verwaarloosbaar volume in</p>
<p>Lenard-Jones potentiaal</p>	<p>Het interactiegedrag tussen moleculen vertoont 2 kenmerken:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Het is attractief op middelgrote afstanden - Repulsief op kleine afstanden <p>⇒ De juiste vorm hangt af vd aard van de interagerende moleculen.</p> <p>Het eenvoudigste geval is de interactie tussen 2 edelgassen. Voor de beschrijving hiervan wordt de Lenard-Jones potentiaal gebruikt;</p>

	 <p>Deze geeft aan hoe de pot. E V(r) tussen 2 atomen vh edelgas verloopt als functie van hun onderlinge afstand.</p> <p>= de afstands tussen 2 atomen waarvoor V(r) = 0; toestand op zeer grote onderlinge afstand overgaat van aantrekkend naar repulsief.</p> <p>= diepte van minimum in de pot. E De 1^e term (+) is repulsief, 2^e term (-) is attractief.</p>
Van de Waals vergelijking	$\left(p + a \frac{n^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$ <p style="text-align: center;"> aangepaste druk aangepast volume </p> <p>b = eigenvolume van 1 mol van het beschouwde gas. a = correctieterm van druk. Reële is lager dan de ideale.</p>
Viriaalvergelijking	$pV_m = RT \left(1 + \frac{B(T)}{V_m} + \frac{C(T)}{V_m^2} + \frac{D(T)}{V_m^3} + \dots\right)$ <p>Nog nauwkeurigere beschrijving voor reële gassen dan de Van der Waals vergelijking. Uitgedrukt in 1 mol zodat het V gelijk wordt aan</p>
Viriaalcoëfficiënt	<p>Functie van de temperatuur van het gas. (karakteristiek voor de interactie tussen de atomen/ moleculen waaruit het gas bestaat).</p>
Hoofdstuk 13: De hoofdwetten van de thermodynamica	
Inwendige E	<p>De som van alle soorten energie in het systeem opgeslagen. Het is een toestandsfunctie. Symbool: U</p>
Eerste hoofdwet	<p>De verandering vd inwendige energie U van gesloten systeem als gevolg van proces wordt gegeven als de som van warmte q die het systeem tijdens het proces opgenomen heeft, en de arbeid w die tijdens het proces op het systeem uitgeoefend werd.</p> $\Delta U = q + w_{\text{gesloten systeem}}$
Arbeid	<p><u>Klassieke mechanica:</u> Wanneer een systeem een kracht F uitoefent op een lichaam waardoor het lichaam verplaatst wordt over een afstand dr, dan heeft het systeem een arbeid W = F · dr geleverd aan het lichaam.</p> <p><u>Thermodynamische conventie:</u> w > 0 voor arbeid verricht op het systeem => arbeid geleverd door het systeem = -</p> $w = - \int_{V_1}^{V_2} F_s dr \quad \text{met} \quad F_s = p_s A \quad \Rightarrow \quad w = - \int_{V_1}^{V_2} p_s A dr = - \int_{V_1}^{V_2} p_s dV$ <p>Arbeid geleverd door het systeem: negatieve grootte!</p>

Theorema	<p>Wanneer een systeem een proces op reversibele wijze uitvoert, dan levert het maximale arbeid.</p>  <ul style="list-style-type: none"> • bewegende zuiger $\Rightarrow p_g$ (de druk net onder de zuiger) is tijdens een spontane expansie altijd de laagste in het systeem (en dus lager dan mocht het systeem in evenwicht zijn) • de geleverde arbeid moet dus kleiner zijn dan voor een reversibel uitgevoerde expansie • algemeen geldig, niet alleen voor gasexpansie
Isobare expansie	<p>Op ieder ogenblik vd expansie is de druk in het systeem dezelfde, en dus kunnen we vervangen door de constante druk p. (curve geeft absolute waarde van uitgewisselde arbeid)</p> 
Enthalpie H	<p>Inwendige E van het systeem + de E die nodig is om ruimte te maken voor het systeem met een gegeven volume en druk;</p> $H = U + pV$ <p>H is een toestandsfunctie</p>
ΔH bij een isobaar proces	<p>ΔH ve gesloten systeem bij een isobaar proces waarin enkel (p,V) arbeid wordt uitgewisseld, wordt gegeven door de warmte die het systeem tijdens dit proces uitwisselt met de omgeving.</p>
Warmte	 <p>potentiële energie: Mgh</p> <ul style="list-style-type: none"> • Massa M laten zakken: omzetten potentiële energie in rotatie-energie van het rad • Na experiment: $T_{\text{eind}} > T_{\text{begin}}$ • Alleen de temperatuur is veranderd \Rightarrow potentiële energie is omgezet in warmte • \Rightarrow warmte is een verschijningsvorm van energie • Eenheid energie: 1 J <p>schoepenrad</p>
Temperatuur vs warmte	<ul style="list-style-type: none"> - T hangt niet af van de uitgebreidheid vh systeem en is dus een intensieve toestandsvariabele. - q hangt af van de massa van het systeem en is dus een extensieve grootheid.
Warmtecapaciteit	<p>De hoeveelheid warmte die moet geïnvesteerd worden om de T vh systeem één Kelvin te verhogen. Symbool: C</p> $C = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{q}{\Delta T} = \frac{dq}{dT}$
Isochore warmtecapaciteit	<p>\tilde{c} is de hoeveelheid warmte die nodig is om bij constant volume de T vh systeem te doen toenemen met een hoeveelheid dT</p> $C_V = \frac{dq_V}{dT} \quad \text{of} \quad dq_V = C_V dT \quad \left \quad C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \right.$ <p>meet de temperatuursafhankelijkheid vd inwendige E vh systeem</p>
Isobare warmtecapaciteit	<p>\tilde{c} is de hoeveelheid warmte die nodig is om bij constante druk de T vh systeem te doen toenemen met een hoeveelheid dT</p> $C_p = \frac{q_p}{dT} \quad \text{of} \quad q_p = C_p dT \quad \& \quad C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$ <p>meet de temperatuursafhankelijkheid vd enthalpie vh systeem</p>

Molaire warmtecapaciteit	<p>Warmtecapaciteit gemeten per eenheid van mol. (intensieve grootheid)</p> $C_{V,m} = \frac{C_V}{n} \quad \text{en} \quad C_{P,m} = \frac{C_P}{n}$
Soortelijke warmte	<p>Warmtecapaciteit gemeten er eenheid van massa (intensieve grootheid)</p> $c_V = \frac{C_V}{M} \quad \text{en} \quad c_P = \frac{C_P}{M}$
Translatie, rotatie en vibratie van moleculen	<p>Voor een diatomische molecules moeten er in totaal 7 onderscheiden energietermen in rekening gebracht worden, overeenkomend met 7 vrijheidsgraden (3 translatie, 2 rotatie, 2 vibratie vrijheidsgraden in een diatomische molecule)</p>  <p>Wanneer q wordt toegevoegd zal dit niet alleen gebruikt worden om de translatie-E te verhogen maar ook opgeslagen worden als rotatie en vibratie eenzelfde hoeveelheid q verhoogt de translatie-E van polyatomisch gas minder dan monoatomisch gas K is een directe maat voor T° (5^e postulaat) hoeveel q die nodig is om T°1 met 1° te laten toenemen bij een polyatomisch gas < voor monoatmisch gas.</p>
Equipartitie principe	Toegevoegde E wordt gelijk opgeslagen in alle mogelijke componenten (translaties, rotaties en vibraties).
Reactiewarmte	<p>Som van alle warmte die tijdens de reactie door het systeem met de omgeving uitgewisseld worden, en de warmte die na afloop vd reactie moet uitgewisseld worden om het systeem terug op zijn begintemperatuur te brengen.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Cte druk; reactiewarmte = enthalpieverandering - Cte volume; reactiewarmte = verandering inwendige E
Exotherme reactie	Reactie waarbij warmte vrijkomt. q<0
Endotherme reactie	Reactie waarbij warmte wordt opgenomen. q>0
Reactie-enthalpie	<p>Reactiewarmte bij constante druk (omgevingsdruk). Δ</p> <p>Grootte van de reactie-enthalpie hangt af van de temperatuur.</p>
Faselabels	<ul style="list-style-type: none"> - Gas = g - Vloeistof = l (liquidus) - Vast = s (solidus) - Waterige oplossing = aq (aqua)
Wet van Hess	<p>De isobare reactiewarmte ve chemische reactie die kan uitgevoerd worden als een som van deelreacties is gelijk aan de som vd isobare reactiewarmten vd deelreacties.</p> $ \begin{array}{rcl} \text{C(grafiet)} + 1/2 \text{O}_2(\text{g}) & \rightarrow & \text{CO}(\text{g}) \quad \Delta H_r = -110.5 \text{ kJ} \\ \text{CO}(\text{g}) + 1/2 \text{O}_2(\text{g}) & \rightarrow & \text{CO}_2(\text{g}) \quad \Delta H_r = -283 \text{ kJ} \\ + & & \\ \text{C(grafiet)} + \text{O}_2(\text{g}) & \rightarrow & \text{CO}_2(\text{g}) \quad \Delta H_r = -393.5 \text{ kJ} \end{array} $ <p>Born-Haber cyclus is een toepassing op deze wet</p>
Wet van Kirchhoff	<p>De reactie-enthalpie hangt af van de temperatuur.</p> $\Delta H_r(T_2) = \Delta H_r(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p dT$ <p>Specificatie van T en p is noodzakelijk!</p>

	<p>De reactie-enthalpie hangt eveneens af van de druk.</p> <p> $\text{H}_2(\text{g}) + 1/2 \text{O}_2(\text{g}) \xrightarrow{\Delta H(T_2)} \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \quad T = 90^\circ\text{C}$ $\text{H}_2(\text{g}) + 1/2 \text{O}_2(\text{g}) \xrightarrow{\Delta H(T_1)} \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \quad T = 10^\circ\text{C}$ </p>
Vormingsenthalpie	Reactie die de vorming voorstelt van 1 mol vd beschouwde verbinding uit de samenstellende atomen, waarbij deze zich bevinden in hun vorm die zij vertonen bij de gekozen p en T.
Nut van de vormingsenthalpie	Voor iedere reactie waarin een bepaalde stof voorkomt, kunnen we gebruik maken van dezelfde vormingsenthalpie vd stof. Dus, ipv oneindig lange lijst van reacties maken we gebruik ve beperkte lijst van vormingsenthalpieën (zelfs bij reacties die experimenteel nog niet werden onderzocht)
Nood aan de tweede hoofdwet	Eerste hoofdwet alléén volstaat niet om het gedrag van de natuur te beschrijven: er moet nog een wet werkzaam zijn, die de richting aangeeft waarin een proces spontaan kan verlopen.
Intrigerende factor	<p>$\frac{-1}{p} dw_{rev} = dV$ - <u>Reversibele arbeid</u> = $-1/p$; de factor waarmee het product van een intensieve factor met een niet-totale differentiaal wordt omgezet tot een totale differentiaal ve extensieve toestandsfunctie</p> <p>De intensieve factor, p, is de eigenschap die er voor zorgt dat de arbeid geleverd kan worden</p> <p>- <u>Reversibele warmte</u> = $1/T$; analoog voor arbeid</p> <p>$\frac{1}{T} dq_{rev} = dS$ de intensieve factor, T, is de eigenschap die er voor zorgt dat er q kan worden uitgewisseld.</p>
Tweede hoofdwet	<p>Ieder spontaan proces gaat gepaard met een toename van de entropie van het universum.</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin: 10px 0;"> $\Delta S_{\text{totaal}} = \Delta S_{\text{omgeving}} + \Delta S_{\text{systeem}}$ </div> <p>① reversibel</p> <p> $\Delta S_{\text{systeem}} = nR \ln \frac{V_f}{V_i} \quad (q_{rev} = nRT \ln \frac{V_f}{V_i})$ $\Delta S_{\text{omgeving}} = q_{omgeving}/T = -q_{systeem}/T = -nR \ln \frac{V_f}{V_i}$ </p> <p>} $\Delta S_{\text{totaal}} = 0$ ("isentropisch")</p> <p>② irreversibel</p> <p> $S \text{ is toestandsfunctie} \Rightarrow \Delta S_{\text{systeem}} = nR \ln \frac{V_f}{V_i}$ $\text{adiabatisch proces} \Rightarrow \Delta S_{\text{omgeving}} = 0$ </p> <p>} $\Delta S_{\text{totaal}} > 0$</p>
Totale omgeving	Alle voorwerpen waartussen warmte uitgewisseld kan worden. De totale omgeving omvat dus het hele universum.
Hoofdwetten volgens Clausius	De energie van onze wereld is constant. De entropie van onze wereld streeft naar een maximum.

Entropie	<p>De maat voor de dispersie (van energie en van de hoeveelheid materie en die energie blijft constant) bij een spontaan proces. Het is een toestandsfunctie.</p>  <ul style="list-style-type: none"> - S is de drijvende kracht achter alle reacties - S bepaalt de spontaniteit van de reacties
Microtoestand	Volledige specificatie van alle microscopische vrijheidsgraden in een systeem.
Formule van Boltzmann	Verband tussen de macroscopische entropie van het systeem, en het aantal mogelijk microtoestanden W van het systeem:
Ordelijke toestand	Een macrotoestand van een systeem, die slechts wordt door een beperkt aantal microtoestanden gerealiseerd wordt.
Wanordelijke toestand	Macrotoestand die wordt gerealiseerd door vele microtoestanden. Entropie wordt meestal geassocieerd met wanorde: de entropie is een maat voor de wanorde in een systeem.
Chemische toepassing op wanorde	<p>Bij deze toepassingen beperken we ons tot het afschatten van ΔS van systeem en niet van universum (want die is uiteraard altijd +).</p> <p>De wanorde en dus de entropie neemt toe wanneer:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Een reactie waarbij een molecuule splits in 2 kleiner moleculen 2) Een reactie waarbij het aantal mol gas toeneemt. 3) Iedere overgang van een vaste stof naar een vloeistof of naar een gas en iedere overgang van een vloeistof naar een gas.
Derde hoofdwet	Het is onmogelijk om het absolute nulpunt te bereiken in een eindig aantal stappen. (Niet op examen)
Hoofdstuk 14: Toepassingen van de thermodynamica	
Onbruikbare arbeid	De expansie-arbeid die niet benut wordt voor het verdere proces.
Maximale bruikbare E	Die door het systeem tijdens een reversibel proces wordt uitgewisseld wordt bepaald door de <i>vrije energie</i> .
Vrije energie	<ul style="list-style-type: none"> - <u>Helmholtz vrije energie</u>: <ul style="list-style-type: none"> $\Rightarrow A = U - TS$ \Rightarrow Bij isochore en isotherme randvoorwaarden \Rightarrow Toestandsfunctie van het systeem \Rightarrow Voor een reversibel proces dat isotherm en isochoor verloopt is $\Delta A =$ maximale bruikbare arbeid - <u>Gibbs vrije energie</u>: <ul style="list-style-type: none"> $\Rightarrow G = H - TS$ \Rightarrow Bij isotherme en isobare randvoorwaarden \Rightarrow Toestandsfunctie van het systeem \Rightarrow Voor een reversibel proces dat isobaar en isotherm verloopt is $\Delta G =$ maximale bruikbare arbeid
Nadeel entropie	<p>Ieder spontaan proces in een adiabatisch systeem gaat gepaard met een entropieverhoging. Bij niet adiabatische processen moet ook rekening gehouden worden met de entropie van de omgeving</p> <ul style="list-style-type: none"> \Rightarrow Moeilijk \Rightarrow Daarom gaat men vaker gebruik maken van Gibbs E
Eigenschap Gibbs E	<p>Een spontaan proces dat isobaar en isotherm verloopt in een gesloten systeem dat met zijn omgeving slechts expansie-arbeid uitwisselt, gaat gepaard met een <u>daling</u> van Gibbs energie van het systeem.</p> <ul style="list-style-type: none"> \Rightarrow Alternatieve formulering van de 2^e hoofdwet \Rightarrow Nuttiger, want heeft alleen betrekking op het systeem, maar minder algemeen door de randvoorwaarden.

Evenwichts-voorwaarde	<p>Een systeem is in evenwicht wanneer zijn <i>Gibbs energie</i>, als functie van de voortgang van mogelijke processen, minimaal is.</p> $\Delta G = \int_{\text{begin}}^{\text{eind}} dG < 0 \text{ voor een spontaan proces}$
Spontaniteit bepaald door Gibbs	<p>$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$, bij spontane reacties moet $\Delta G < 0$</p> <p>Mogelijke tekencombinaties van ΔH en ΔS:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) $\Delta H +$ en $\Delta S +$; $\Delta G > 0$ de reactie is niet spontaan 2) $\Delta H +$ en $\Delta S -$; <ul style="list-style-type: none"> \Rightarrow Voor lage T is $T\Delta S < \Delta H$ en dus $\Delta G > 0$ (niet spontaan) \Rightarrow Voor hoge T is $T\Delta S > \Delta H$ en dus $\Delta G < 0$ (spontaan) 3) $\Delta H -$ en $\Delta S +$; <ul style="list-style-type: none"> \Rightarrow Voor lage T is $T\Delta S$ (absolute waarde) $< \Delta H$ en dus $\Delta G < 0$ \Rightarrow Voor hoge T is $T\Delta S$ (absolute waarde) $> \Delta H$ en dus $\Delta G > 0$ 4) $\Delta H -$ en $\Delta S -$; $\Delta G < 0$ (spontaan)
Gibbs E van een ideaal gas	<p>$dG = Vdp - SdT$ In een gesloten systeem is G functie van 2 onafhankelijke variabelen, p en T</p> <p>- Isotherm: $dT = 0 \Rightarrow dG = Vdp$</p>
Chemische potentiaal	<p>Gibbs energie per mol van het gas. Symbool:</p> <p>Voor een ideaal gas: $\mu(T) = \mu^*(T) + RT \ln p$</p> <p>Voor een reëel gas: $\mu(T) = \mu^*(T) + RT \ln f$</p> <ul style="list-style-type: none"> \Rightarrow Chemisch potentiaal ve ideaal gas stijgt met de p vh gas. \Rightarrow Materie-stroom van gebied met hoge chemisch potentiaal naar gebied met laag chemisch potentiaal.
Fugaciteit	<p>Effectieve druk. Symbool:</p> <p>Gassen zullen zich meer en meer ideaal gedragen naarmate de p daalt dus, $= 1$</p>
Partieel molaire waarden	$\left(\frac{\partial Y}{\partial n_i} \right)_{p,T,n_j} = \bar{Y}_i$
Partieel molaire grootheden	Bv. Molaire volume ingenomen door juist één mol, molaire entropie etc.
Partieel molaire Gibbs energie	<p>= het chemisch potentiaal van een de stof i</p> $\left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{p,T,n_j} = \mu_i$
Evenwichts-voorwaarde	Bij evenwicht tussen de fasen van een systeem moet de <i>chemische potentiaal</i> voor elke stof eenzelfde waarde hebben in iedere fase.
Vorderingsgraad	Variabele symbool:
Evenwichtsconstante	Bij chemisch evenwicht!
Reactie quotiënt	<p>Wanneer de reactie niet in chemisch evenwicht is, noteren we;</p> <p>3 gevallen;</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Indien $< Q$, verschuift de reactie naar rechts 2) Indien $> Q$, verschuift de reactie naar links 3) Indien $= Q$, reactie is in evenwicht.
Reële gasreacties	Voor een chemische reactie die optreedt in reële gassen, gedragen de reagentia zich nooit ideaal. Hiermee kan rekening gehouden worden adhv fugaciteit .

Wet van Le Châtelier	Bij verandering van één vd grootheden die de ligging van een dynamisch evenwicht bepalen, verschuift het evenwicht zodanig dat het effect vd verandering zoveel mogelijk wordt tegengewerkt.
Invloed van druk	<p>1. $a+b > c+d$</p> <p>$\Rightarrow (c+d-a-b) < 0$ en dus: als $p \uparrow$ dan $p^{c+d-a-b} \uparrow$ } $x_C, x_D \uparrow$ evenwicht verschuift in de richting van het kleinste aantal moleculen (want $a+b > c+d$)</p> <p>$\Rightarrow \frac{x_C^c x_D^d}{x_A^a x_B^b} \downarrow$ want K_p is constant! } $x_A, x_B \downarrow$</p> <p>\Rightarrow drukdaling, tegengesteld aan de opgelegde verandering</p> <p>2. $a+b < c+d$</p> <p>$\Rightarrow (c+d-a-b) > 0$ en dus: als $p \uparrow$ dan $p^{c+d-a-b} \uparrow$ } $x_C, x_D \downarrow$ evenwicht verschuift in de richting van het kleinste aantal moleculen (want $a+b < c+d$)</p> <p>$\Rightarrow \frac{x_C^c x_D^d}{x_A^a x_B^b} \downarrow$ }</p> <p>\Rightarrow drukdaling, tegengesteld aan de opgelegde verandering</p>
Invloed van temperatuur	<p>Verhoging van temperatuur:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Exotherme reactie; evenwicht verschuift naar links, in de richt waarin het systeem warmte opneemt en dus de T doet dalen. - Endotherme reactie; evenwicht verschuift naar rechts, dus doet de T stijgen. <p>Daling temperatuur; omgekeerde</p>
Vergelijking van Van 't Hoff	<p>Uitdrukking die de temperatuursafhankelijkheid van Kwantitatief weergeeft.</p> $\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H^\ominus}{RT^2}$
Haber-Bosh proces	<p>Synthese van ammoniak</p> <pre> graph TD N[Nitrogen From the air] --> Mix[Nitrogen And Hydrogen 1:3 by volume] H[Hydrogen From natural gas] --> Mix Mix --> Reactor[400 - 450°C 200 atm iron catalyst] Reactor --> Cool[gases are cooled and ammonia turns to liquid] Cool --> Storage[To storage/ industrial use] Cool --> Recycle[Unreacted gases Recycled] Recycle --> Mix </pre>