**Algemene Chemie I –**

**voorbereidende vragen**

**Deel 1: de chemische binding**

*Ontaarding* = Voor het waterstofatoom hebben toestanden met dezelfde n maar een verschillende waarde van l steeds dezelfde energie. Dergelijke toestanden noemt men **ontaarde** toestanden.

1. Welke problemen in de klassieke natuurkunde ken je die aanleiding gaven tot de ontwikkeling van het kwantummechanica?

*- Zwartelichaamstraling (opgelost door Max Planck)*

Hij nam aan dat de energie E opgeslagen in een elektromagnetische golf met frequentie ν slechts welbepaalde waarden kan aannemen, gegeven door de betrekking:

E = nhν

Met:

n = geheel getal => energiekwantisering

ν = frequentie

h = cte van Planck

*- Foto-elektrisch effect (opgelost door Albert Einstein)*

Licht bestaat uit golfpakketjes (fotonen) waarvan frequentie een energie draagt:

E­foton = hν

Om e- uit plaat te halen is bepaalde energie nodig. Bij uittreden van e- komt een foton vrij door absorptie van een foton. Energie foton wordt overgedragen aan het e-.

Foton moet frequentie hebben die hoog genoeg is => energie niet gebruikt om e- los te maken, wordt omgezet in kinetische energie.

Verhogen intensiteit zorgt voor meer fotonen per tijdseenheid die invallen op de plaat ==> meer foto-elektronen.

Hieruit volgt het duaal karakter van licht (zie boek voor afleiding p. 28):

*- Stabiliteit van Rutherford atoom (opgelost door Bohr)*

Bohr model = model v. Rutherford + 2 postulaten:

- Kwantizatie draaiimpuls = enkele bepaalde banen toegelaten + elektron zendt in stationaire toestand geen EM straling uit.

- Exitatie v. e- door opname foton en de-exitatie door uitzenden foton.

*- Lijnenspectrum (opgelost door Bohr)*

1. Welke experimenten en modellen ken je die vooraf gingen aan het atoommodel van Bohr?

*- Proef van J.J. Thomson (bestaan van elektronen)*

Kathodestraal exp.: ontladingsbuis en gaatje in anode, waardoor klein deel van de kathodestraal passeert. Hierachter stonden 2 geladen platen. De straling werd afgebogen naar de positieve pool, dus de straal moest negatief zijn. Eigenschappen van de straal hingen niet af van het gas in de buis of metaal van de kathode en anode ==> alle atomen moesten dit deeltje bevatten.

==> Tomson atoommodel = plumpudding-model

*- Model van Thomson (Plumpudding - model)*

Elektron was bouwsteen van alle materie en negatief. Dus moest er ook een positief deeltje zijn. Elektron was maar klein deel van de massa v.e. atoom ==> positief deeltje is zwaarder. Hij stelde dat de positieve en negatieve lading over heel het atoom verspreid lagen.

*- Isotopen van J.J. Thomson (Neon afgebogen)*

Bundel van elektronen ioniseert kleine hoeveelheid neon. Door botsing van elektronen met neon atoom, kan er een elektron worden weggerukt uit het atoom waardoor het atoom positief geladen wordt. Dan wordt het neon versneld door een elektrisch veld en zo tussen de polen v.e. magneet geleid. De bundel wordt gebogen en splitst op in 2 delen ==> massagetallen verschilden, dus moesten in sommige kernen meer neutronen zitten (grotere massa).

*- Proef van Millikan (lading van elektron)*

In een kamer gevuld met lucht en twee horizontale elektroden, vernevelt men olie. De druppeltjes vertonen door de wrijving tijdens het vernevelen een kleine elektrische lading. De druppeltjes vallen naar beneden, eerst met versnelling, dan door wrijving op cte snelheid.

In bovenste, positieve elektrode zit een gatje waar enkele druppeltjes doorvallen. De onderste elektrode is negatief. Als er een geladen deeltje tussen beide komt en de elektrische kracht van het veld is gelijk aan de gravitatiekracht, blijft het deeltje zweven. Niet alle geladen deeltjes dragen dezelfde lading, maar wel gehele veelvouden van elkaar.

Lading:

е = 1.602 x 10-19 C

Afleiding zie cursus

*- Proef van Rutherford (alpha-straler + metaalfolie)*

Meeste deeltjes drongen door de folie ==> vooral ijle structuur.

Maar er werden er ook onder grote hoek afgebogen ==> botsen op zware massieve kern.

1. Hoe wijkt het atoommodel van Bohr af van de golfmechanische beschrijving van het atoom?

Het resultaat bij de waarschijnlijkheidsverdeling voor een elektron in de laagstenergetische toestand van het waterstofatoom is verschillend met het gedrag in het Bohr-atoom. In het Bohr-atoom doorloopt het elektron een baan met constante straal, wat betekent dat de opeenvolgende metingen van de elektron-kern afstand steeds een identieke waarde zou moeten opleveren bij de waarschijnlijkheidsverdeling, maar dit is niet zo.  
Als het nevenkwantumgetal l=0 dan zou het elektron moeten stilstaan en zou het atoom ophouden met te bestaan, als l verschilt van nul, dan is de waarde van de draaiimpuls nooit gelijk aan het hoofdkwantumgetam n \* h, zoals gesteld in het postulaat van Bohr.

1. Welke kwantumgetallen ken je, en waarvoor dienen ze?

*- Hoofdkwantumgetal "n"*

Grootte van het orbitaal n = 1, 2, 3, ...

In het H-atoom bepaalt het de energie (gekwantiseerd):

*- Nevenkwantumgetal "l"*

Vorm van het orbitaal l = 0, 1, 2, ..., n-1

l = 0 ==> s- orbitaal

l = 1 ==> p- orbitaal

l = ...

Bepaalt de grootte van de orbitaal-draaiimpuls van het elektron (gekwantiseerd):

Bepaalt de grootte van het magnetische dipoolmoment (gekwantiseerd)

*- Magnetisch kwatumgetal "m­l"*

Ruimtelijke oriëntatie: ml = -l, -l + 1, ... , l

Bv.: Px kàn ml = 1 hebben en Py dan ml  = 0 (Niet zeker, dus ook niet kennen)

Bepaalt de grootte van de component van de orbitaal-draaiimpuls in de meetrichting (richting van uitwendig magnetisch veld):

*- Spinkwantumgetal "ms"*

Geeft elektronenspin weer: ms = ±1/2

Bepaalt de grootte van de component van de spin-draaiimpuls in de meetrichting:

1. Welk effect heeft het aanleggen van magnetisch veld op de energie van een elektron?

*- Het Zeeman-effect:*

We stellen dat het gedrag van de atomaire magnetische dipool hetzelfde is als dat van een kompasnaald. Voor het waterstofatoom in een uitwendig veld wordt op deze basis verwacht dat door de interactie van de atomaire magnetische dipool met het magneetveld de spectraallijnen van het waterstofatoom verschuiven. **In werkelijkheid ziet men echter niet alleen een verschuiving, maar neemt men ook waar dat de spectraallijnen opsplitsen in een aantal componenten.**

Spectraallijnen = Deel van het elektromagnetisch spectrum waar een chemische stof zich anders gedraagt dan in de omgeving ervan.

1. Leg het concept “orbitaal” uit.

Een orbitaal is een 3D- waarschijnlijkheidsverdeling die het gedrag van een elektron in een atoom beschrijft.

Golffunctie:

Dit is de meest waarschijnlijke plek waar je een elektron terugvindt. Omdat door de waarschijnlijkheidsvergelijking een duidelijk verschil werd aangetoond met het gedrag in het Bohr-atoom, spreken we niet van de “baan van het elektron”, maar van het orbitaal dat door een elektron bezet wordt. We zeggen ook dat dit de driedimensionale waarschijnlijkheidsverdeling is, die het gedrag van een elektron in een atoom beschrijft

1. Welke trends kan je beschrijven in het radiale en angulaire gedeelte van atoomorbitalen?

*- Radiaal gedeelte*

Gekarakteriseerd door 2 kwantumgetallen, n en l

- Wanneer n groter wordt, wordt de waarschijnlijkheidsverdeling van het elektron diffuser. Dit wil zeggen dat het elektron minder en minder op één

bepaalde afstand tot de kern aangetroffen wordt.

- Het nevenkwantumgetal beïnvloed de **gemiddelde** afstand van een elektron tot de kern **niet.**

*- Angulaire gedeelte*

Wordt bepaald/gekarakteriseerd door 2 kwantumgetallen, l en ml

- De golffuncties voor de s- orbitalen bevatten geen hoekafhankelijke factor: deze factoren zijn m.a.w. gelijk aan 1. ==> hoekafhankelijk gedeelte van de waarschijnlijkheid in alle richtingen dezelfde waarde heeft.

-

1. Wat is het zgn. penetratie-effect in de beschrijving van meer-elektronen systemen?

In een meer-elektronen systeem gaat elk toegevoegd elektron interfereren met het potentiaalveld van een ander.

We weten uit de radiale waarschijnlijkheidsverdeling van de orbitalen dat ook een elektron in een hogere schil zich soms zeer dicht bij de kern ophoudt. Op zulke ogenblikken is het beschouwde elektron diep in het gebied waarin de lager gelegen elektronen geconcentreerd zitten, waardoor hun afscherming van de kernpotentiaal verminderd. Dit is het **penetratie-effect.**

1. Wat zijn het Pauli-verbod, het Aufbau principe en de Regel van Hund?

*- Pauli-verbod*

Geen twee elektronen in eenzelfde atoom kunnen dezelfde 4 kwantumgetallen (n, l, ml, ms) hebben.

=

Geen twee elektronen in eenzelfde systeem bevinden zich in dezelfde kwantumtoestand.

*- Aufbau principe*

De energie van het elektron stijgt met zijn hoofdkwantumgetal n.

Binnen eenzelfde schil, stijgt de energie van het elektron met zijn nevenkwantumgetal l.

*- Regel van Hund*

= Regel van de maximale multipliciteit:

Wanneer meerdere elektronen in een verzameling ontaarde orbitalen aanwezig zijn, dan heeft de configuratie met het maximale aantal door het Pauliverbod toegelaten evenwijdige spin de laagste energie.

**Uitzonderingen:** Enkele van de overgangsmetalen (na Ca). Bv.: Cr en Cu gaan een elektron van het 4s orbitaal promoveren naar het 3d orbitaal.

1. Hoe is de tabel van Mendeljev opgebouwd?

Groepen zijn de kolommen en perioden zijn de rijen. De plaats van een element in de tabel van Mendeljev, en daarom zijn chemische aard, wordt bepaald door de lading van de kern, dus door het aantal protonen in de kern. Twee opeenvolgende elementen in de tabel van Mendeljev verschillen telkens één kernlading.

1. Welke periodische atoomeigenschappen ken je? Kan je die periodiciteit verklaren?

*- Atoomstraal / covalentstraal*

De elektronen van een atoom zitten niet altijd op dezelfde plaats. Daarom nemen we hier de afstand tussen twee atomen die covalent gebonden zijn. Periodisch karakter:

1. Binnen een periode van de Tabel van Mendelejev neemt de atoomstraal af met toenemend atoomnummer.
2. Binnen iedere groep van de Tabel van Mendelejev neemt de atoomstraal toe met het nummer van de periode.

**Effectieve kernlading:** Lagerliggende elektronen shcermde de kernlading af. De elektrische lading die de potentiële energie van een valentie-elektron bepaalt, is dan bij benadering (door penetratie-effect) gelijk aan de echte kernlading verminderd met het aantal elektronen die in lagere schillen zitten.

a) kan verklaard worden aan de hand van effectieve kernlading. Doordat het atoomnummer stijgt in eenzelfde periode, maar met een gelijk aantal elektronen in lagere schillen, worden de elektronen sterker aangetrokken door de kern waarvan de lading ook stijgt. Daardoor zal de atoomstraal afnemen.

b) elementen van een bepaalde kolom van de Tabel van Mendelejev hebben nagenoeg dezelfde effectieve kernlading die de valentie-elektronen ondervinden. De bezetting van de onderschillen is eveneens hetzelfde. Enkel het hoofdkwantumgetal stijgt van boven naar onder en we weten daardoor dat de afstand tot de kern toeneemt.

*- Ionisatiepotentiaal*

**Ionisatiepotentiaal** van een atoom is de energie die nodig is om het elektron dat in de grondtoestand van het atoom het orbitaal met de hoogste energie bezet, volledig uit het gasvormige neutrale atoom te verwijderen.

Periodisch karakter:

1. Binnen een periode, neemt het ionisatiepotentiaal toe.
2. Binnen een groep, neemt het ionisatiepotentiaal af.

Verklaring:

De ionisatiepotentiaal van een elektron is evenredig met de potentiële energie die het elektron in het neutrale atoom heeft. Deze laatste wordt in sterke mate bepaald door de effectieve kernlading die het elektron ondervindt. Vermits deze laatste binnen een periode toeneemt, zal ook de ionisatiepotentiaal toenemen.

Uitzonderingen:

- Het eerste p elektron van een schil is minder sterk gebonden dan het ns elektron van het vorige element, daardoor is de ionisatiepotentiaal van het p elektron lager dan dat van ns elektron.

- Element met configuratie ns2np4 een lagere ionisatiepotentiaal dan het element met configuratie ns2np3. Dit komt omdat het vierde p elektron in zijn orbitaal gepaard zit met een ander elektron, en door dit laatste afgestoten wordt, en dus makkelijker te verwijderen is.

*- Elektronen affiniteit*

**Definitie:** Energie die vrijkomt wanneer een gasvormig neutraal atoom van een bepaald element een elektron opneemt ter vorming van een negatief ion.

Periodisch karakter:

1. Elementen uit de eerste groep vormen wel stabiele negatieve ionen, maar de elementen van groep 2 niet.

Verklaring:

a) Door het toevoegen van een elektron aan een atoom van groep 1 ontstaat een afgesloten s-onderschil, terwijl het toevoegen van een elektron aan een element van groep 2 zou leiden tot een toestand waarbij slechts één elektron in de p onderschil aanwezig is: toestanden met afgesloten onderschillen blijken dus stabieler dan die met open onderschillen.

1. Waarom zijn de edelgassen zo stabiel?

Iedere elektronenconfiguratie waarin de s- en p- orbitalen van de hoogste schil volledig gevuld zijn, noemt men een edelgasconfiguratie. Hierdoor is er geen energie te winnen door bijvoorbeeld twee atomen dicht bij elkaar te brengen en hun golffuncties te combineren.

1. Wat is de LCAO benadering, en hoe geeft deze aanleiding tot bindende en antibindende orbitalen?

LCAO = Lineaire Combinatie van Atoom Orbitalen

We maken lineaire combinaties van atoomorbitalen. Bijvoorbeeld in het geval van H2+ maken we de combinatie uit twee atoomorbitalen, één die een waterstoforbitaal rond het proton A beschrijft, terwijl de andere een waterstoforbitaal rond proton B beschrijft. **Zie formules boek p. 82**

*- Bindend orbitaal*

Het elektron van een H2+ molecule bevindt zich in het ψg orbitaal. De energie Eg blijkt negatief te zijn, behalve bij heel kleine interatomaire afstanden, m.a.w. deze toestand is stabieler dan de ongebonden toestand.

De energie van het systeem daalt als we de afstand tussen beide atomen verkleinen. Dit wil dus zeggen dat het zich stabiliseert.

Bij het verder verkleinen van de afstand zien we dat er uiteindelijk een minimum energie bereikt wordt. Hierbij bevindt het elektron zich in het orbitaal beschreven door de functie ψg en de afstand tussen de protonen is 2,5 Bohr.

*- Antibindend orbitaal*

Dit is zo goed als tegengesteld aan het bindend orbitaal. De energie van het systeem met het elektron in het ψu orbitaal is steeds hoger dan de ongebonden toestand. Door de afstand te vergroten kan deze energie verlaagd worden en zal het molecule zich stabiliseren. M.a.w. als het elektron in het ψu orbitaal geplaatst wordt, zal het spontaan dissociëren. = **Repulsieve toestand.**

1. Beschrijf de totale energie van het waterstofmolecule ion als functie van de afstand tussen de protonen.

De laagste energie wordt bereikt als het e- zich tussen de kernen bevindt. De hoogste energie wordt bereikt als het e- zich buiten de kernen bevindt

1. Leg het concept “molecuulorbitaal” uit.

We kunnen het molecuulorbitaal opsplitsen in twee soorten: bindend en antibindend. Dit komt door de combinatie van twee atoomorbitalen waaruit steeds twee molecuulorbitalen gevormd worden.

We kunnen stellen dat bv. in het waterstofatoom ion een waterstofatoom bindt met een proton. Na deze binding bevindt het elektron zich zowel rond de ene als rond de andere kern. Dit is een essentieel kenmerk van de covalente binding.

1. Wat is een orbitaalenergiediagramma?

Links en rechts in het diagram worden op de verticale enengie-as de ligging van de betrokken atoomorbitalen weergegeven. Centraal in het diagram worden de liggingen van de moecuulorbitalen weergegeven. Merk op dat het antibindend orbitaal iets verder verwijderd van de 1s orbitalen wordt weergegeven dan het bindend orbitaal omdat dit een hogere energie draagt.

1. Hoe kunnen para- en diamagnetisme verklaard worden op moleculaire schaal?

*- Paramagnetische stoffen:*

= stoffen die sterk door een magnetisch veld worden aangetrokken.

Het is aangetoond dat dit veroorzaakt wordt door vrije elektronen. Elk elektron heeft een spin waardoor zich het als een mini magneet gedraagt. Deze kleine magneet zet zich in de richting van het aangelegde magnetisch veld en is dus magnetisch. Het spreekt voor zich dat atomen met twee elektronen in het zelfde orbitaal niet magnetisch zijn door de opheffing van de tegengestelde mini magneten door de tegengestelde spins.

*- Diamagnetische stoffen:*

= vertonen verwaarloosbare interactie met aangelegd magnetisch veld.

Als de atomen of moleculen van de onderzochte stof enkel gepaarde elektronen voor, dan gedraagt die stof zich diamagnetisch.

1. Welke “soorten” moleculaire orbitalen ken je, en wat is de oorsprong van hun verschillen?

Omdat de drie p-orbitalen van eenzelfde schil onderling loodrecht staan, kan het px orbitaal van het ene atoom slechts lineaire combinaties vormen met het px orbitaal van het andere atoom, en analoog voor de andere orbitalen.

*- σ-orbitalen:*

De p-orbitalen langs de molecuulas vormen een σ-binding.

*- π-orbitalen:*

De p-orbitalen die loodrecht op de molecuulas staan combineren daarentegen tot π-orbitalen. Omdat in ieder atoom twee p-orbitalen aanwezig zijn die loodrecht op de molecuulas staan, ontstaan twee bindende π-orbitalen. Vermits de twee loodrecht p-orbitalen van ieder van de atomen equivalent zijn, zijn de gevormde π-orbitalen eveneens equivalent (omdat het dezelfde atomen zijn), m.a.w., de twee bindende π- orbitalen zijn energetisch ontaard.

1. Leg kort uit wat “HOMO” en “LUMO” orbitalen zijn.

HOMO = Highest Occupied Molecular Orbital. Zo is bij Li2 σ2s de HOMO orbitaal.  
LUMO = Lowest Unoccupied Molecular Orbital. Zo is bij Li2 σ2s\*de LUMO orbitaal.

1. Geef de regels voor het tekenen van Lewisstructuren.

**Regel 1:** Totaal aantal valentie-elektronen berekenen v. molecule. Som van valentie-elektronen van alle atomen.

**Regel 2:** Schrijf de skeletstructuur van de molecule.

**Regel 3:** Verdeel de elektronen over de atomen die het centrale atoom omringen. Zorg dat ze aan octetregel voldoen.

**Regel 4:** Verdeel de overblijvende elektronen paarsgewijs over de centrale ato(o)m(en).

1. Leg het concept “resonantievorm” uit.

Bv bij NO2, in de molecule is in totaal één dubbele binding aanwezig, maar het elektronpaar dat aanleiding geeft tot de dubbele binding zit verspreid over de 2 N-O bindingen. Omdat in zulke binding de elektronen uitgespreid zijn over meer dan 2 atomen, spreekt men van een gedelocaliseerde binding. Wanneer we een gedelocaliseerde binding toch met Lewis structuren willen voorstellen, dan gebruiken we de resonantie-beschrijving.

1. Wat zijn formele ladingen, en waarvoor kan je ze gebruiken?

Uit het aantal vrije elektronen dat het atoom permanent (dat geen covalente binding aangaat) kan dan door vergelijking met het aantal valentie-elektronen van het neutrale atoom, afgeleid worden welke de lading is die een atoom in een op deze wijze geïdealiseerde Lewis structuur heeft.

- Som van de formele ladingen van een molecule of een ion moet gelijk zijn aan de lading van de molecule of het ion.

- Lewisstructuur bepalen:

- Formele ladingen 0 ==> beste structuur

- Als formele ladingen niet nul ==> structuur met laagste aantal formele ladingen.

- In moleculen, 2 atomen met zelfde teken formele lading ==> onwaarschijnlijk.

- Structuur met neg. formele lading op atoom met grootste ENW is de beste.

- Juiste skeletstructuur bepalen.

1. Wat is het verschil tussen sp, sp2 en sp3 hybridisatie?

De term ‘hybridisatie’ wordt gebruikt om te verklaren waarom een element meerdere bindingen aangaat dan dat men zou verwachten. Neem CH4 bijvoorbeeld, waarin het C atoom de elektronenconfiguratie (He)2s^2 2p^2 heeft. Men zou dus aannemen dat dit C atoom maar twee covalente bindingen zou kunnen vormen. Hij heeft er echter vier. Men zegt dan dat een elektron van de s orbitaal ‘gepromoveerd’ wordt daar de p orbitaal. Omdat de 2s en 2p orbitalen van koolstof relatief dicht bij elkaar liggen, is de benodigde energie echter relatief klein. Door deze promotie ontstaat een geexciteerde toestand. Dit geven we aan door een sterretje te plaatsen bij het chemische symbool. Hierdoor kan het C atoom wel 4 bindingen aangaan. De s en p orbitaal worden dan samengenomen als 1 orbitaal, in dit geval het sp^3 orbitaal. De bindingscapaciteit van een sp3 orbitaal gelijk is aan 2.0. Dit is hoger dan die van het s orbitaal, 1, en die van het p orbitaal, 1.732. Daarom zijn de chemische bindingen gevormd uit sp3 hybride orbitalen sterker dan die gevormd uit s of p orbitalen. Het verschil tussen de verschillende soorten hybridisatie ligt dan in het feit dat voor een sp^3 hybridisatie ervoor gezorgd wordt voor 4 mogelijke bindingen, bij sp^2 voor 3 en bij sp hybridisatie voor 2. De bindingscapaciteit van sp^2 is 1.991 en van sp 1.932. Nog een verschil ligt in de vorm (=hoekwaarschijnlijkheid) van het gehybridiseerde orbitaal. (zie cursus voor de tekeningetjes)

1. Hoe ontstaan, in VB theorie, enkele bindingen en dubbele bindingen?

Dubbele bindingen ontstaan door een zijdelingse overlap van de niet-gehybridiseerde p orbitalen.

1. Vergelijk kort valentiebindingstheorie met moleculaire orbitaal theorie.

VB: Elektronen gelocaliseerd in specifieke bindingen, binding vereist orbitaal overlap (berekenen via overlapintegraal S) en per overlappend orbitaal minstens 1 max. 2 elektronen.

Bij MO zijn molecuulorbitalen verspreid over gehele moleculen en zijn gedelocaliseerd (hebben niet slechts betrekking op 1 binding). Bij VB theorie zijn de orbitalen gelokaliseerd op een specifieke plaats (steeds betrekking op 1 binding). MO geeft de correcte energieën weer.

1. Leg het begrip elektronegativiteit uit, en een korte beschrijving van een aantal schalen.

De elektronegativiteit van een element is de mate waarin een atoom van dat element de neiging vertoont om bindende elektronen naar zich toe te trekken.

1) De Mulliken-elektronegativiteiten: de elektronegativiteit X= (I-E)/2 waarbij I de ionisatiepotentiaal (positief getal, staat voor afstaan van een elektron) en E de elektronaffiniteit (negatief getal, staat voor opnemen van een elektron) is.

2) De Pauling-elektronegativiteit: het verschil in elektronegativiteit tussen de atomen A en B is evenredig met het verschil tussen de bindingsenergieën van de molecule A-B en het meetkundig gemiddelde van de bindingsenergieën van de molecule A-A en B-B.

Δ’ = D(A-B) – {D(A-A) \* D(B-B)}^1/2

Bovendien vertoont de absolute waarde van het verschil in elektronegativiteiten tussen A en B volgende relatie met Δ’: |Xa-Xb| = V(Δ’/30)

3) Alfred-Rochow elektronegativiteitsschalen: X = (0.359\*Zeff)/rcov^2 + 0.744 met Zeff de effectieve kernlading en rcov de covalentstraal.

1. Welke bindingskarakteristieken ken je en relateer deze aan MO, VB of Lewis structuren.

Als eerste hebben we de bindingsorde. De definitie hiervan is de volgende: De bindingsorde is gelijk aan het aantal bindende elektronparen die door de twee atomen gedeeld worden. Ook voor polyatomische moleculen kunnen bindingsordes zowel een geheel als een niet-geheel getal zijn. Behandelen we eerst enkele gehele bindingsorden.

Bindingsorde 1: Dit is de bindingsorde voor het geval er slechts een enkele binding tussen beide atomen aanwezig is. Waterstof, ammoniak en methaan zijn allemaal van de eerste bindingsorde.

Bindingsorde 2 Deze bindingsorde komt onder meer voor in CO2, en is eveneens de orde van de koolstof-koolstof binding in etheen

Bindingsorde 3 Wanneer tussen twee atomen in totaal drie covalente bindingen aanwezig zijn, dan is de orde van de binding tussen deze atomen gelijk aan 3. Deze bindingsorde vinden we terug in stikstof, koolstofmonoxide, ethyn en het cyanide ion.

Niet-gehele bindingsorden Deze bindingsorden komen voor bij gedelocaliseerde bindingen. In het voorbeeld van het nitriet-ion wordt het elektron- paar dat de dubbele binding vormt gedeeld door de twee stikstof-zuurstof bindingen, wat betekent dat dit elektronpaar aan iedere binding een bin- dingsorde gelijk aan 1/2 bijdraagt. Omdat het andere elektronpaar tussen N en ieder O atoom een orde 1 levert, is de totale bindingsorde voor de N-O binding in NO−2 gelijk aan 3/2. In het carbonaation komen er in ie- dere resonantievorm in totaal vier bindende elektronparen voor, die gedeeld worden door drie bindingen. De bindingsorde BO voor de C-O binding in dit ion is daarom 4/3. Voor een willekeurige molecule of ion XYn waarin gedelocaliseerde bindingen tussen X en Y voorkomen kan dit veralgemeend worden tot de formule:

BO= (aantal bindende elektronenparen tussen X en Y)/n

Een tweede bindingskarakteristiek is de bindingslengte. De bindingslengte is uiteraard de lengte van de binding. De bindingslengte van een binding A-B kan beschouwd worden als de som van de covalentstralen van de atomen A en B. De bindingslengte heeft ook een relatie met de bindingsorde: hoe hoger de bindingsorde, hoe kleiner de bindingslengte.

De derde en laatste bindingskarakteristiek is de bindingsenergie.

De bindingsdissociatie-energie, in het kort bindings- energie of dissociatie-energie, van een chemische binding wordt gedefinieerd als de energie die aan een molecule toegevoegd moet worden om de be- schouwde binding te verbreken. Als deze wordt gemeten bij constante druk dan noemen we zo ook reactie-enthalpie. (zie thermodynamica). Een positieve bindingsenergie duid erop dat de reactie energie opneemt. De definitie die in de cursus staat voor bindingsenergie is de volgende: De bindingsenergie van een binding A-B is de gemid- delde reactie-enthalpie ∆H die nodig is voor het verbreken van binding A-B in de gasfase. Hoe hoger de bindingsorde hoe hoger de bindingsenergie.

1. Waarop is de VSEPR theorie gebaseerd?

De VSEPR theorie is gebaseerd op een aantal eenvoudige regels, die allen het gevolg zijn van de elektrische afstoting tussen de elektronen in de valentieschil van een atoom. Een covelante binding heeft haar stabiliteit te danken aan het feit dat het bindende elektronpaar zich concen- treert in het gebied tussen de twee atomen die het met elkaar verbindt. Dit betekent dat ten overstaan van het ene atoom het bindende elektronpaar een ruimtelijke concentratie in een welbepaalde richting, met name in die van het andere atoom, vertoont. Wanneer het atoom nog andere covalente bindingen vormt, dan vertoont het eveneens concentraties aan negatief ge- laden elektronen in andere ruimtelijke richtingen. Omdat elektronen elkaar elektrisch afstoten, zullen de elektronwolken van de onderscheiden bindingen de neiging vertonen zich zover mogelijk verwijderd van elkaar op te stellen. Dit is het basisprincipe van het VSEPR model. Niet alleen bindende elektronparen, maar ook vrije elektronparen die op een atoom aanwezig zijn vertonen de neiging om zich te concentreren in een ruimtelijke richting. De volgorde in afnemende repulsie is de volgende: Vrij paar:vrij paar > vrij paar:bindend paar > bindend paar:bindend paar

1. Geef de regels voor het voorspellen van de molecuulstructuur adhv VSEPR theorie.

1. Stel de Lewis structuur van de molecule op.

2. Bepaal het aantal concentratiegebieden rond het centrale atoom in de Lewis structuur.

3. Bepaal aan de hand van hun aantal, de stabielste opstelling van de concentratiegebieden.

4. Wanneer meer dan één opstelling van vrije elektronparen en chemische bindingen mogelijk zijn, dan wordt die opstelling verkozen die de repulsies tussen de vrije elektronparen minimaliseert.

5. Leid de molecuulstructuur af uit de opstelling van de atomen aan de uiteinden van chemische bindingen.

1. Wat zijn de verschillen tussen de ionaire binding, de covalente binding en de metaalbinding?

verbinding uit reactie van resp. 1) m-nm 2) nm-nm 3) m-m

De covalente binding is een binding waarbij de molecule in stand wordt gehouden doordat ze een of meerdere elektronen deelt.

Een ionaire binding wordt gevormd door het afgeven en opnemen van elektronen door atomen. We zullen dit illustreren adhv een voorbeeld. Als men NaCl opsplitst dan krijgt men Na+ en Cl-, twee ionen. De molecule blijft bestaan door de aantrekkingskracht tussen de verschillende ladingen.

Een metaalbinding si het delen van elektronen doorheen het kristal. Model: elektronenwolkmodel. De metaal atomen zijn gerangschikt in een dichtgestapeld rooster, waarin elk atoom een of meerdere elektronen verliest. De gevormde metaalionen worden de atoomharten genoemd. . De elektronen bewegen zich vrij binnen de grenzen van het metaal, zoals moleculen van een ideaal gas in een vat. De elektronen worden binnen het metaal gehouden door de Coulomb krachten, uitgaande van de atoomharten. Deze worden bijeengehouden door de elektrostatische aantrekking van de beweeglijke elektronen tussen hen in. De mobiele elektronen doen dus als het ware dienst als een soort “elektronenlijm”.

1. Wat is de Born-Haber cyclus?

De Born-Haber cyclus is een cyclus die bestaat uit een reeks opeenvolgende reacties zoals we die hierboven beschreven hebben, om reactie enthalpie ̈en te kunnen analyzeren, en heeft betrekking op de vorming van een ionaire verbinding uit de reactie van een metaal met een niet-metaal. Typisch worden Born-Haber cycli gebruikt om de roosterenthalpie te bere- kenen van een kristal. Deze enthalpie is immers niet direct meetbaar! De roosterenthalpie is de enthalpieverandering die optreedt bij de vorming van een ionaire verbinding uit de samenstellende gasvormige ionen. In Figuur 3.1 is het voorbeeld van NaCl getoond. (zie d e cursus pagina 174 voor een voorbeeld). De Born\_haber cyclus is eigenlijk een rechtstreekse toepassing van de wet van Hess (zie thermodynamica).

1. Geef een korte beschrijving van bandentheorie.

Elektronen in een molecule vormen atomaire orbitalen. Daarna zijn we te weten gekomen dat deze atomaire orbitalen met elkaar interageren en moleculaire orbitalen gaan vormen die elk een andere energie hebben. Het aantal orbitalen is evenredig met de aantal elektronen. Als we nu een zeer grote molecule hebben met zeer veel orbitalen die onderling maar weinig verschillen in energie. Daarom vormen de energieniveaus in vaste stoffen energiebanden. De bindende (sigma) orbitalen vormen de ‘valentieband’ (wordt bezet door valentie-elektronen) en de antibindende (sigma ster) orbitalen vormen de conductieband. Als de valentie- en conductieband elkaar raken (zie afbeelding op pagina 182 vd cursus) kan de binding makkelijk elektriciteit geleiden, omdat de elektronen dan makkelijker van het ene niveau naar de andere kunnen ‘gepromoveerd’ worden. Dit is de verklaring voor de hoge elektrische geleidbaarheid van metalen.

1. Waarin verschillen geleiders, halfgeleiders en isolatoren van elkaar?

Het verschil kan met verklaren adhv de bandentheorie. Zoals in de vorige vraag gezegd wordt, als de valentie- en conductieband elkaar raken (zie afbeelding op pagina 182 vd cursus) kan de binding makkelijk elektriciteit geleiden, omdat de elektronen dan makkelijker van het ene niveau naar de andere kunnen ‘gepromoveerd’ worden. (geleiders) Als er echter een te groot energieverschil is tussen de valentieband en de conductieband, is er geen geleiding mogelijk. (isolatoren) Men spreek van een halfgeleider indien het energieverschil niet groot is, maar ook niet 0, zodat sommige elektronen dit energieverschil kunnen overwinnen. Bij geleiders daalt de geleidbaarheid bij stijgende temperatuur, dit komt doordat de ionen meer trillen en dan de doorgang beperken. Bij halfgeleiders echter neemt de geleidbaarheid toe bij stijgende temperatuur, omdat er bij hogere temperatuur er meer elektronen in de conductieband komen

1. Wat is het verschil tussen intermoleculaire krachten en intramoleculaire krachten?

Intramoleculaire krachten zijn de krachten die atomen en subatomaire deeltjes op elkaar uitoefenen binnen een molecule. Intermoleculaire krachten zijn een bepaalde groep van interacties, die hoofdzakelijk bepaald worden door de krachten die werkzaam zijn tussen moleculen onderling.

1. Leg kort uit wat het veschil is tussen ion-dipool, dipool-dipool, dipool-geïnduceerde dipool en geïnduceerde dipool – geïnduceerde dipool interacties.

Ion-dipool: een ion creëert vanwege zijn lading in zijn omgeving een sterk elektrisch veld. (sterker dan dipool). **Sterke Coulom interactie.** Dipolen zoals H2O interageren met dit vel bv. hydratatie van ionen: dicht bijzijnde watermoleculen zullen quasi permanent hechten aan het ion oppervlak. –hydratatie energie komt vrij.

Dipool-dipool: wanneer 2 dipolen in elkaars buurt komen dan proberen ze zich tegengesteld te richten omdat daardoor de potentiele energie van het geheel verlaagd wordt. (**richtende kracht tussen de dipolen onderling)** Zwakker en minder permanent dan ion-dipool (hydratatie). Dus continue vorming en verbreking van dipool-dipool interacties. Tussen N O F en H worden waterstofbruggen gevormd door sterke polariteit -> wel sterke binding -> hoog kookpunt

Keesom krachten

Dipool-geinduceerde dipool: een niet-polair molecule in contact met een polair molecule. bv tussen O2 en H2O, wanneer de O molecule de watermolecule nadert langs de kant van het partieel negatief geladen O atoom, dan zal deze negatieve lading de elektronen van de O molecule afstoten. De O molecule wordt gepolariseerd, mogelijk gemaakt door **polariseerbaarheid.**

Debye krachten

Geinduceerde dipool-geinduceerde dipool: interacties tussen niet-polaire moleculen. De elektronen van een van de atomen gaan zich meer aan 1 zijde van de kern dan aan de andere zijde bevinden en vertoont een dipoolmoment. (**momentane dipoolmomenten)** Zwakste interactie: London dispersie krachten