

(Y) VOORWOORD

Dit is de samenvatting chemie ter voorbereiding van de toets van atomen en moleculen, let op: deze samenvatting is bedoeld voor de richtingen met 2u chemie (wetenschapsrichtingen)

---

(X) INHOUDSTAFEL

(1) ATOOMBOUW

(2) STRUCTUUR VAN MOLECULEN

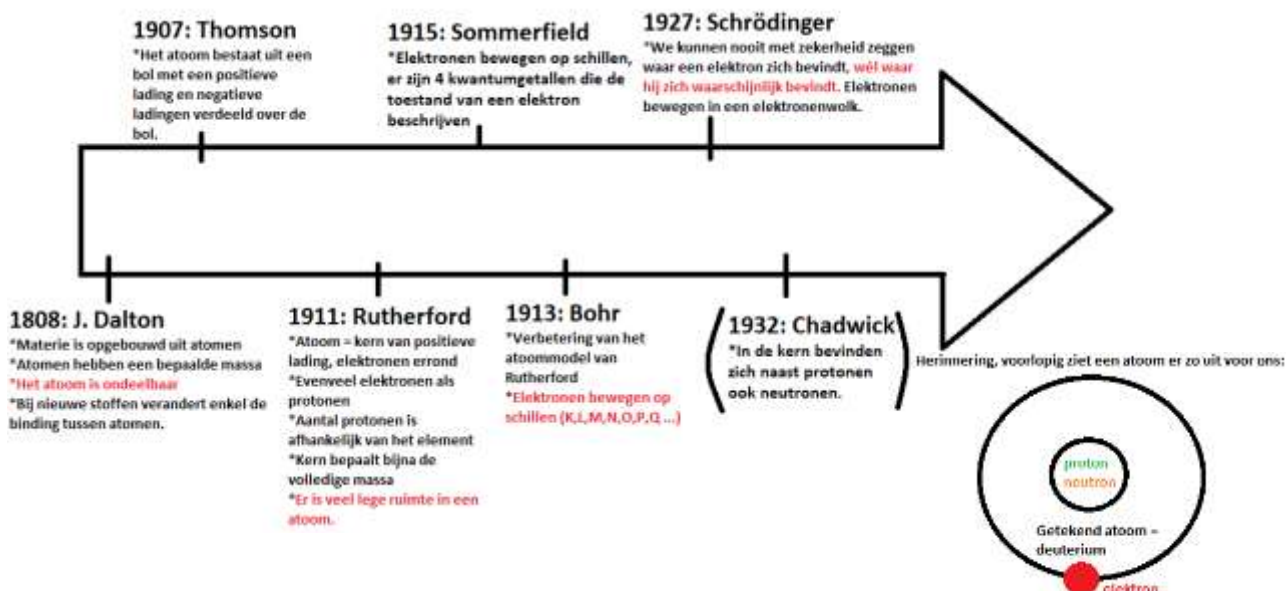
---

(1) ATOOMBOUW

---

(1A) DE EVOLUTIE VAN HET ATOOMMODEL

\*Wetenschappers hebben vroeger de bouw van het atoom onderzocht, onderstaande tijdlijn vat hun bevindingen samen: **(tijdlijn behalve Chadwick dient gekend te zijn!)**



\*In het 3de jaar zijn we gestopt bij het atoommodel van Bohr, echter is dit géén 100% juiste representatie van het atoom. Daarom breiden we het dit jaar uit tot Sommerfield/Schrödinger.

---

(1B) VAN BOHR TOT SOMMERFIELD TOT SCHRÖDINGER

---

(1BI) SNELLE HERHALING VAN BOHRS ATOOMMODEL

\*Elektronen bewegen op schillen rond de kern.

→ Elke elektron heeft een bepaalde hoeveelheid energie, gaat hij naar een lagere schil geeft hij energie af ⇔ gaat hij naar een hogere schil neemt hij energie op (hij wordt aangeslagen, dit proces dat een elektron naar een hogere schil gaat = excitatie)

→ De potentiële energie van een elektron rekenen we uit door:  $E(p) = F \cdot r$ , hierbij is  $r$  de straal van het atoom. **Hoe verder een elektron van de kern is, hoe meer energie hij bevat.**

\*Er zijn 7 schillen: K = ( $n = 1$ ), L = 2, M = 3, N = 4, O = 5, P = 6, Q = 7

→ De nummer van een schil is het **hoofdkwantumgetal  $n$** .

→ De maximale hoeveelheid elektronen op één schil berekenen we met de formule:  $2n^2$  ( $n$  = hoofdkwantumgetal), rekening houdende met dat één schil maximum 32  $e^-$  mag bevatten.

→ Voorbeeld: M-schil:  $n = 3 \rightarrow 2n^2 = 2 \cdot 3^2 = 2 \cdot 9 = 18$ , de M-schil mag max. 18 elektronen hebben.

\*Elektronen op de buitenste schil noemen we **valentie-elektronen**, deze elektronen zijn het belangrijkste bij de **vorming van nieuwe moleculen**.

\*Bohr heeft enkel experimenten op waterstof uitgevoerd toen hij het atoom onderzocht, echter de hogere atomen complexer dan dat. Met nieuw apparatuur kon Sommerfeld verder onderzoek verrichten.

#### (1BII) SOMMERFELDS ATOOMMODEL

\*Het energieniveau van een elektron wordt beschreven door **4 kwantumgetallen**:

→ **Hoofdkwantumgetal (n)**: hoofdschil van het atoom --> n gaat van 1 tot 7.

→ **Nevenkwantumgetal (l<sub>i</sub>)**: aantal subschillen van de hoofdschil (ja, de hoofdschillen bestaan uit subschillen)

--> l<sub>i</sub> gaat van 0 tot en met n-1 tot en met n = 4, na het vierde subniveau komt er géén bij.

--> n = 1 → één subniveau: l<sub>i</sub> = 0 (s!) → s-subschil

--> n = 2 → twee subniveaus: l<sub>i</sub> = 1 (p!) → s-subschil, p-subschil

--> n = 3 → drie subniveaus: l<sub>i</sub> = 2 (d!) → s-subschil, p-subschil, d-subschil

--> n = 4 → vier subniveaus: l<sub>i</sub> = 3 (f!) → s-subschil, p-subschil, d-subschil, f-subschil

--> elke subschil mag maar een maximum aantal elektronen:

s-subschil = maximum 2, p-subschil = max 6, d-subschil = max 10, f-subschil = max 14!

→ **Magnetisch kwantumgetal (m<sub>i</sub>)**: deelt de subschillen op in magnetische deelniveaus.

--> m<sub>i</sub> gaat van -l<sub>i</sub> tot l<sub>i</sub>.

--> het p-subschil heeft dus drie magnetische deelniveaus (-1, 0, 1): p<sub>x</sub>, p<sub>y</sub>, p<sub>z</sub>.

--> elk magnetisch deelniveau bevat maximum 2 elektronen.

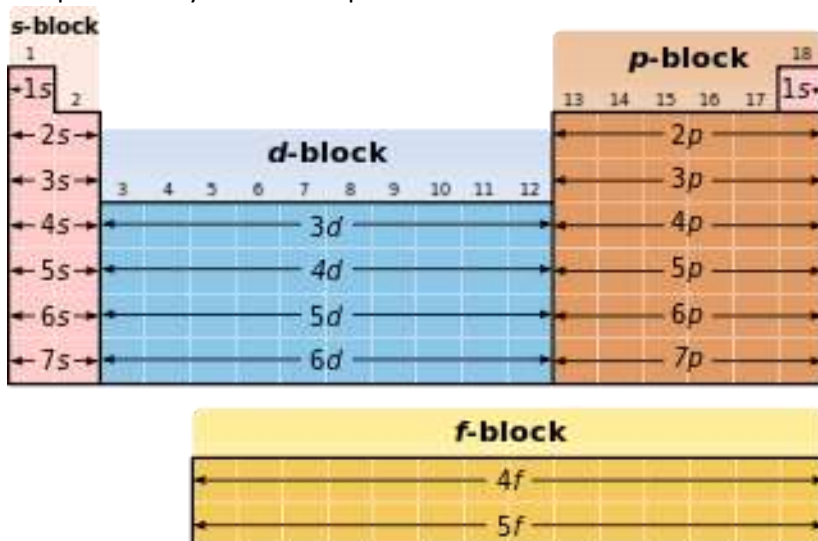
→ **Spinkwantumgetal (m)**: geeft de richting van een elektron in het magnetisch deelniveau weer.

--> Twee waarden mogelijk: +1/2 (↑) of -1/2 (↓).

\*Terwijl Bohr enkel het hoofdkwantumgetal ontdekte heeft Sommerfeld de andere kwantumgetallen kunnen ontdekken. Daarom is dit atoommodel ook een uitbreiding op Bohr.

#### (1BII<sub>a</sub>) SUBSCHILLEN (nevenkwantumgetal!) IN VERBAND MET HET PERIODIEK SYSTEEM

\*Het periodiek systeem valt op te delen in 4 blokken:

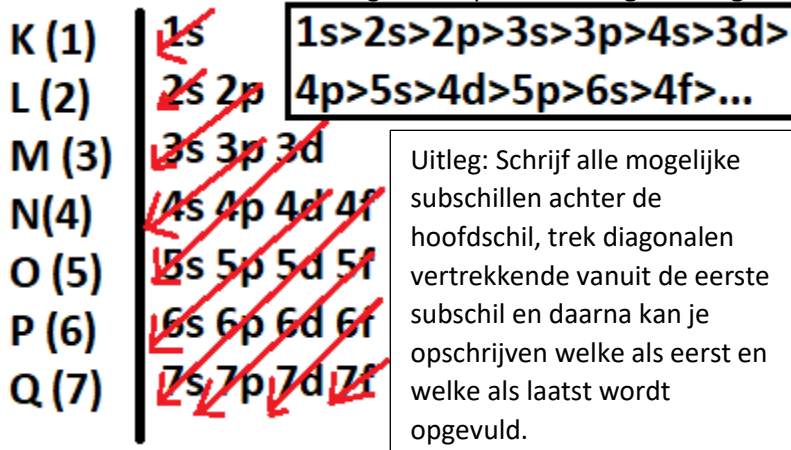


In de s-blok zullen de valentie-elektronen altijd 's' zijn, in de d-blok 'd', in de p-blok 'p' ... van links naar rechts in elke blok verhoogt de hoeveelheid elektronen op de subschil, Na zal dus eindigen op 3s<sup>1</sup> terwijl Ca (naast Na) zal eindigen op 3s<sup>2</sup>.

#### (1BII<sub>b</sub>) ELEKTRONENCONFIGURATIES OPSTELLEN MET SUBSCHILLEN

\*Vroeger stelden we elektronenconfiguraties op met de gewone schillen, nu leren we deze opstellen met subschillen aangezien we ons atoommodel hebben uitgebreid.

\*We stellen de elektronenconfiguratie op met de **diagonaalregel** op, wtf is dit?



→ Voorbeeld: Ca (12 elektronen) =  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$  (verband met PSE: eindigt op  $s^2$ !)

Fr (87 elektronen) =  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^1$

→ **Let altijd op het periodiek systeem, Fr zit ervoor in de s-blok in periode 7, als je laatste schil niet  $7s^1$  is heb je het 100% zeker fout!**

→ **Opmerking:** Je zal het misschien verwarrend vinden dat we van 4 naar 3 springen, maar dankzij de subshillen is de volgorde van energieniveaus anders. Sommige subshillen hebben een hoger energieniveau desondanks ze op een lagere hoofdschil behoren.

\*De elektronenconfiguratie van Fr was een grote bevalling, omdat wetenschappers lui zijn hebben we een **kortere notatie** uitgevonden: **[vorige edelgas] + [elektronenconfiguratie]**

→ Voorbeeld: Ca =  $[_{10}\text{Ne}] 3s^2$  (die  $[_{10}\text{Ne}]$  vervangt de  $1s^2 2s^2 2p^6$ )

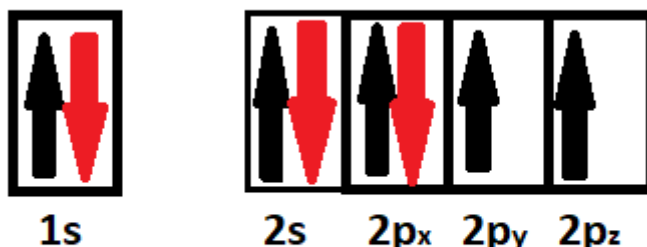
Fr =  $[_{86}\text{Rn}] 7s^1$  (dat is al véél minder dan daarjuist)

(1BII<sub>c</sub>) VERBODSREGEL VAN PAULI EN REGEL VAN HUND

\*Verbodsregel van Pauli: **binnen eenzelfde atoom verschilt elk elektron van een ander door minstens één van de vier kwantumgetallen. Twee elektronen in eenzelfde magnetische niveau bezitten dus altijd een tegengestelde spin.**

\*Regel van Hund: **Als we de magnetische deelniveaus opvullen (herinnering: elke subshil valt te onderverdelen in magnetische deelniveaus), dan zal elk elektron eerst apart een deelniveau opvullen. Als er meer elektronen dan deelniveaus zijn zullen er twee elektronen moeten in één deelniveau.** → verduidelijking van de regel van Hund: afbeelding + uitleg hieronder.

**O heeft 8 elektronen**



Eerst tekenen we de eerste 5 verdeeld over alle magnetische deelniveaus.

Daarna teken we pas de overige elektronen in de magnetische deelniveaus!

**Let op: maak deze fatale fout nooit!**

2 pijltjes omhoog (of 2 beneden) in éénzelfde magnetisch deelniveau te zetten! Dit gaat niet omdat tegengestelde ladingen elkaar afstoten (fysica), **echter door de tegengestelde spin wordt er een magnetisch veld gemaakt en worden ze toch aangetrokken.** Indien (hypothetisch) de elektronen éénzelfde spin zouden hebben, is er géén magnetisch veld en zullen ze dus volledig afgestoten worden. Daarom kan je **NOOIT** 2 pijltjes omhoog of beneden hebben in hetzelfde magnetisch deelniveau!

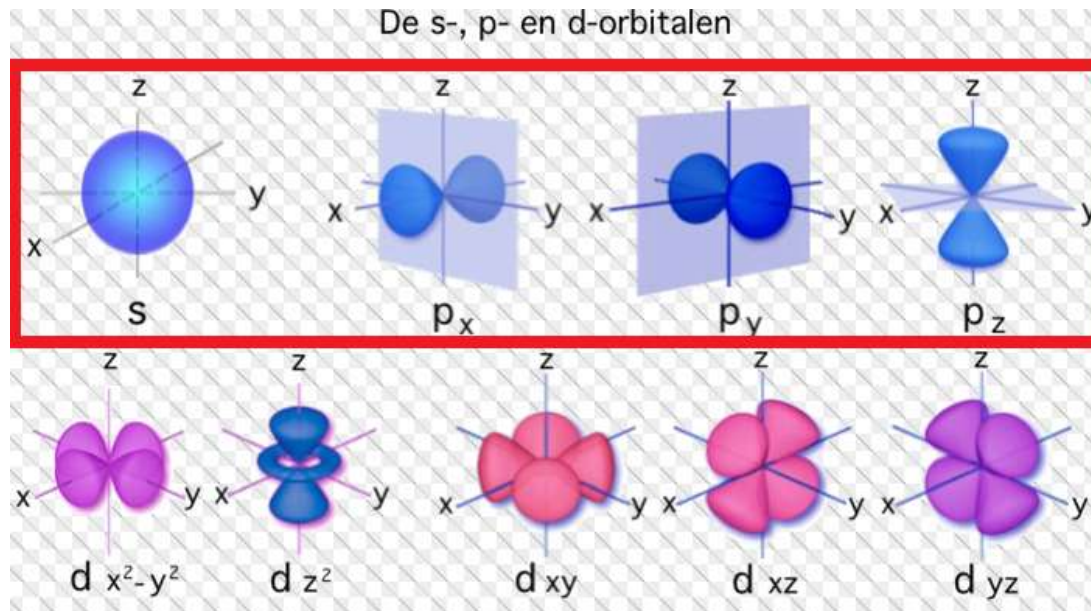


### (1BIII) SCHRÖDINGER DOET NOG EEN LAATSTE UITBREIDING (ATOOMORBITALEN)

\*Volgens Schrödinger weten we **nooit 100% zeker** weten waar het elektron zich bevindt, we gaan uit van een **waarschijnlijkheid**.

\*Schrödinger ontdekte wiskundig de **atoomorbitalen**, dit zijn gebieden waarin de waarschijnlijkheid om een elektron aan te treffen het grootst is (echter zijn we niet 100% zeker).

\*Ruimtelijke voorstelling s- en p- en d-orbitalen (**enkel voorstelling van s- en p- kennen!**):



→ Hoe onthouden? s = een bol

$p_x$  = zandloperachtig op x-as  $\Leftrightarrow p_y$  = zandloper ("") op y-as  $\Leftrightarrow p_z$  = "" op z-as

\*De laatste elektron van zuurstof (O) bevindt zich in het  $p_z$ -orbitaal (magnetisch deelniveau), dus als je dit moet tekenen, teken je die zandloper. Je houdt ook in je achterhoofd dat we daar het **meeste kans hebben om de elektron te vinden**.

## (2) STRUCTUUR VAN MOLECULEN

### (2A) HERHALING VAN BINDINGSTYPES GEZIEN IN HET 3DEJAAR CHEMIE

\*Covalente binding: Twee atomen delen elektronen met elkaar, hierdoor ontstaat een **gemeenschappelijk** elektronenpaar tussen de atomen. Bijvoorbeeld: waterstofgas =  $H-H$ .

→ Uitbreiding naar het 5dejaar: **deze binding ontstaat door het overlappen van 2 orbitalen**.

→ Een binding ontstaat door het overlappen van 2 orbitalen = een  **$\sigma$ -binding (sigmabinding)**

→ De aantrefkans om de elektron te vinden is groter aan de **polairste** kant v/d molecule

\*Ionbinding: Een ionbinding is een binding waarbij één atoom een elektron geeft aan de andere.

Hierdoor gaan de moleculen zich rangschikken in een ionrooster.

### (2B) NIEUWE BINDINGSTYPES

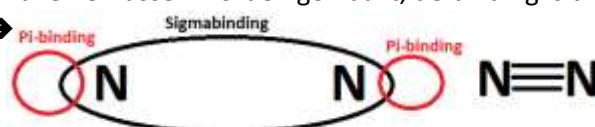
#### (2BI) $\sigma$ -BINDING EN $\pi$ -BINDING

\* $\sigma$ -binding: een binding gemaakt door het lineair overlappen van 2 orbitalen → Bv.:  $H-H$

→ Dit gaat enkel bij een enkelvoudige atoombinding!

\* $\pi$ -binding: bij een dubbele of drievoudige covalente binding is er géén plek meer om lineair te overlappen, hierdoor zullen er lussen worden gemaakt, de binding is twee- of drielobbig

→ Bijvoorbeeld:  $N_2$  →



Er zijn 3 bindingen dus één frontaal (sigma) en twee pi-bindingen (lussen).



## (2BII) HYBRIDISATIE

### (2BII<sub>a</sub>) SP<sup>3</sup>-HYBRIDISATIE

\*Definitie: de aanpassing van verschillende atoomorbitalen tot gelijkwaardige (molecule)orbitalen.

→ Elektronenconfiguratie van C in grondtoestand:  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$  ⇔ maar **3 orbitalen**.

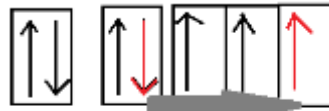
⇔ Huh? C staat onder IVa (4a) in het periodiek systeem dus zou hij er 4 moeten hebben!

Hebben ze ons weeral voorgelogen?! → Wees gerust, we zijn niet (opnieuw) voorgelogen.

→ **Om dit op te lossen gaat C één elektron promoten naar het 2p<sub>z</sub> orbitaal.**

→ Elektronenconfiguratie van C in aangeslagen toestand:  $1s^2 \underline{2s^1} 2p_x^1 2p_y^1 \underline{2p_z^1}$

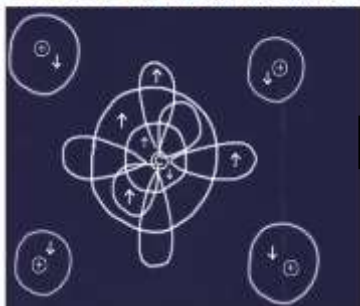
→ In de nieuwe elektronenconfiguratie en visuele voorstelling zie je dat één elektron is gepromoveerd.



\*Als C nu methaan wil vormen, zal door interactie met de s-orbitalen van H een geheel nieuw orbitaal ontstaan. Het sp<sup>3</sup>-orbitaal.

Promotie naar sp<sup>3</sup>-hybride

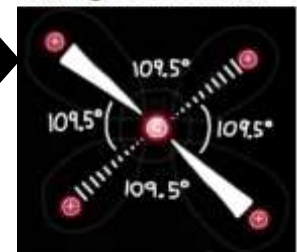
C voor sp<sup>3</sup>-hybridisatie, C wil binden met die 4 H's om methaan te maken.



C na SP<sup>3</sup>-hybridisatie, C bereidt zich voor om met H te binden



C na binding (overlapping v. orbitalen) met H, ze vormen het SP<sup>3</sup>-orbitaal, ertussen is een bindingshoek van 109,4°

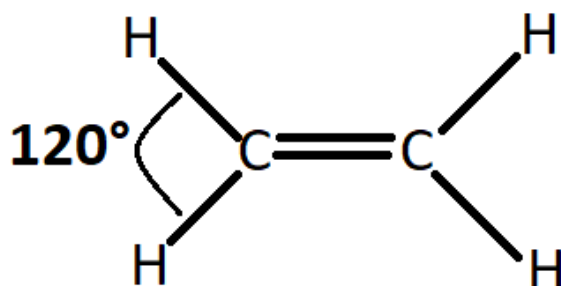


Opmerkingen: C vormt 4 sigmabindingen met H (aahja, want lineaire overlapping, er zijn 4 enk. bindingen). Dezelfde denkwijze is mogelijk voor ethaan, propaan, butaan ...

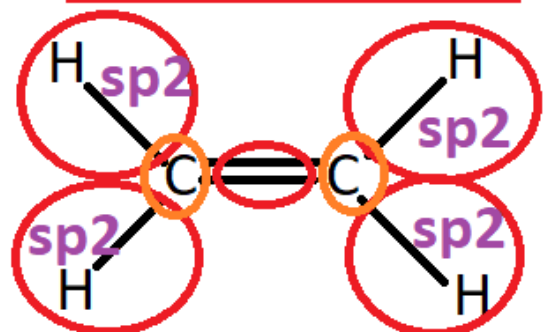
Een atoom met bindingshoek 109° = **tetraëder**

### (2BII<sub>b</sub>) SP<sup>2</sup>-HYBRIDISATIE

\*Als C etheen wilt vormen (*herinnering: organische stoffen met achtervoegsel -een zijn alkenen, er is altijd een dubbele binding tussen de C's*), dan is er sprake van **sp<sup>2</sup>-hybridisatie**. De 2s, 2p<sub>x</sub> en 2p<sub>y</sub> elektronen zullen **één orbitaal** vormen (het sp<sup>2</sup>-orbitaal), dit om telkens een sigmabinding met waterstof te maken. Het 2p<sub>z</sub>-elektron zal een pi-binding vormen.



### Sigma-bindingen



→ Herinnering: die lussen zijn pi-bindingen, pi-bindingen

zijn altijd lussen. Organische stoffen met een bindingshoek van 120° hebben een trigonale structuur.

### Pi-bindingen

## (2BII<sub>c</sub>) SP-HYBRIDISATIE

\*Nu wilt C methyn vormen...

\*Zelfde principe als  $sp^3$  en  $sp^2$ , alleen is er nu i.p.v. één pi-binding twee (want we hebben een driedubbele binding tussen alkynen). Dus twee pi-bindingen en één sigma-binding tussen C, ook één sigma-binding tussen C en de H's.

## (2BII<sub>d</sub>) HYBRIDISATIE VAN VRIJE ELEKTRONEN

\*Herhaling begrippen: waterstofbrug = binding tussen H en O, F, N, Cl. Sterkste binding.  
dipoolmolecule = polaire molecule met 2 polen.

**\*Hybridisatie gebeurt niet enkel bij koolstof.**

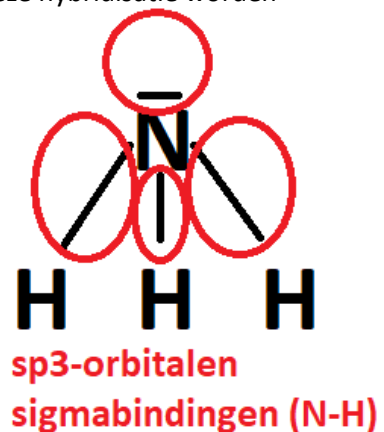
\*Als N met 3 x H wil binden om  $NH_3$  te vormen zullen de s- en de p-orbitalen allereerst moeten hybridiseren tot  $sp^3$ -hybridisatie vooraleer er gebonden wordt, na deze hybridisatie worden er drie sigmabindingen (enkelvoudige bindingen) gemaakt met H.

Uitleg:

elektronenconfiguratie N:  $1s^2 2s^2 2p^1_x 2p^1_y 2p^1_z$

→ De vetgedrukte subschillen zullen hybridiseren tot het  $sp^3$ -hybride, na binding met waterstof vormt het een  $sp^3$ -orbitaal.

Echter is er één vrij  $sp^3$ -elektronenpaar, dit elektronenpaar zal extra afstotingskracht uitoefenen (gelijke ladingen stoten elkaar af), daarom is de bindingshoek van deze tetraëder een beetje afwijkend; niet  $109^\circ$  maar  $104^\circ$ .



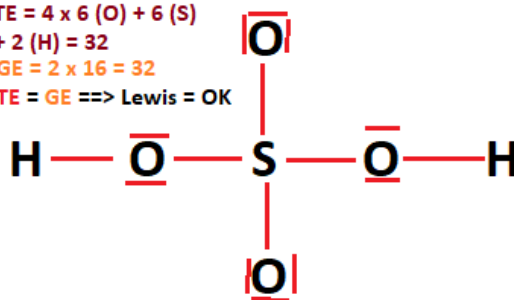
## (2C) LEWISSTRUCTUREN (HERHALING CHEMIE 3DEJAAR)

\*Bij een lewisformule teken we enkel de bindende (valentie-) elektronen, omdat deze belangrijk zijn voor de chemische reacties.

→ Puntje voor één elektron ⇔ streepje voor een gepaard elektron.

→ Bv.: Cl (7 valentie-elektronen):  $\text{Cl}\cdot$

$H_2SO_4$ : **Stap 1: bindingen tekenen, elk atoom edelgas-configuratie geven.**  
 $TE = 4 \times 6 (O) + 6 (S) + 2 (H) = 32$   
 $GE = 2 \times 16 = 32$   
 $TE = GE \Rightarrow$  Lewis = OK



### ? Wtf is datieve binding ?

→ Bij  $H_2SO_4$  heeft O te weinig elektronen om een binding aan te gaan met S. S lost dit op door twee elektronen vrij te stellen, hij geeft deze twee elektronen als het ware zodat O toch met hem kan binden. Dit is een **datieve binding**.

## (2D) POLAIRE EN APOLAIRE MOLECULEN (HERHALING CHEMIE 4DEJAAR)

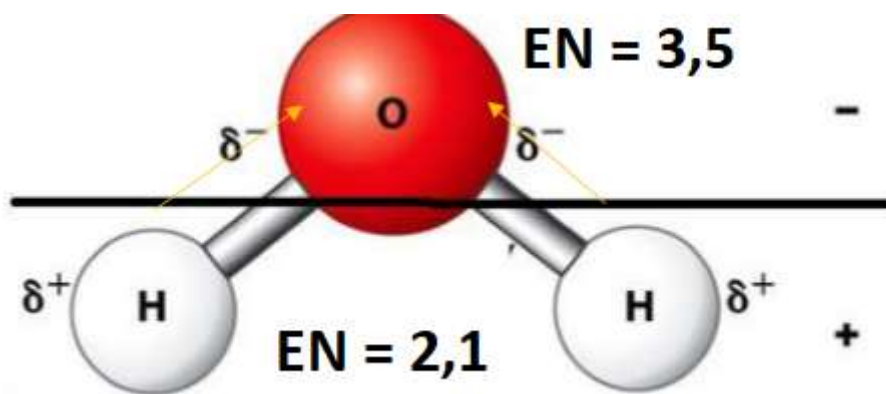
\*Elektronegatieve waarde (EN): elk atoom heeft een EN, dit is de hoeveelheid aantrekkingskracht het atoom uitoefent op zijn elektronen.

→ Als in een binding  $\Delta EN = 0$  (beide atomen hebben dus dezelfde EN) is er géén aantrekkingskracht van één van beide atomen, de binding is apolair: bv.  $H - H$  ( $H_2$ ).

→ Als een molecule symmetrisch is, is de molecule apolair: bv.  $H - H$  ( $H_2$ ).

→ Als in een binding  $\Delta EN \neq 0$ , dan is de aantrekkingskracht van één van beide atomen groter. Een atoom wordt gedeeltelijk positief geladen ( $\delta^+$ ), de andere gedeeltelijk negatief geladen ( $\delta^-$ )

→ Als een molecule asymmetrisch is, is de molecule apolair: bv.  $H_2O$



\*Formele lading = #buitenste elektronen atoom in lewisformule - #buitenste elektronen neutraal atoom. Streepjes worden voor de helft gerekend voor het ene en andere atoom.

→ Bv.: S → In H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (tekening: vorig puntje) tellen we 4 elektronen (aahja! Streepjes eentje voor S en eentje voor O), in S apart (in neutrale toestand) tekenen we 6 elektronen.

→ Formele lading = 4 - 6 = -2.

\*In de b-groepen zien we bv. bij Mangaan (Mg) dat 3d een hogere energieniveau dan 4s heeft, we spreken niet meer van buitenste schil maar valentieschil. Het 3d-schil is verantwoordelijk voor het aangaan van bindingen, niet het 4s-schil, desondanks hij een hogere n (hfdkwantumgetal) heeft!

## (2E) GEOMETRIE VAN MOLECULEN EN MEERATOMIGE IONEN

\*Geometrie = bindingshoeken, dit onderdeel bestudeert de bindingshoeken.

→ Bepaald door het sterisch getal (SG), om het SG te berekenen tel je alle bindingen op in de lewisformule. Let op: dubbele- en drievoudige bindingen tellen als één! CH<sub>4</sub>: SG = 4 (want 4 bindingen rond de C!) → Je telt letterlijk gewoon alle bindingen op.

→ De waarde van SG bepaalt de geometrie (bindingshoeken) van de molecule.

SG	Bindingshoek	Geometrie	Voorbeelden	Hybridisatie
4	109° (ruimte)	Tetraëder, piramide ...	CH <sub>4</sub> , NH <sub>3</sub> ...	Sp <sup>3</sup>
3	120° (vlak)	Trigonaal, V-structuur	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , SO <sub>2</sub> ...	Sp <sup>2</sup>
2	180° (lineair)	Lineair	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> ...	Sp

→ Tabel goed kennen, zo kan je bindingen bespreken als mevrouw dit vraagt!

## (2D) MESOMERIE (= RESONANTIE)

\*Als je lewisstructuren tekent zal je soms met één probleem te maken hebben, er zijn méérdere mogelijkheden om de dubbele bindingen te tekenen. Echter zullen ze allemaal géén perfecte voorstelling geven van het atoom, bijvoorbeeld CO:

\*Als oplossing zijn deze structuren samengevoegd tot een resonantiestructuur, deze structuren houden zich echter niet aan de edelgasconfiguratie (ze overschrijdt deze!).

→ De aantrekkingskracht van elektronen is verspreid over een groter gebied (mesomerie), de bindende atomen die niet tussen twee- maar drie atomen voorkomen = gedelokaliseerd.

