



Vrije Universiteit Brussel

Faculteit Ingenieurswetenschappen

Formules Chemie

Egon Geerardyn

revisie 0.4b (22 januari 2007)



Voorwoord

Referenties

1. PROF. R. WILLEM, *Chemie: Structuur en Transformaties van de materie*, Dienst Uitgaven VUB 2006.
2. PROF. M. BIESEMANS en PROF. R. WILLEM , *Chemie: Oefeningen*, Dienst Uitgaven VUB 2006.
3. BROWN, LEMAY en BURSTEN , *Chemistry: the Central Science (10th Edition)*, Pearson Education 2006.

Inhoudsopgave

1	Chemische Thermodynamica	3
1.1	Enthalpie	3
1.1.1	Wet van Hess	3
1.2	Entropie	4
1.3	Chemische Evenwichten	4
1.3.1	Wet van Le Châtelier	4
2	Zuur-Base-evenwichten	5
2.1	Classificatie van zuren/basen	5
2.2	pH-berekening	6
2.3	Buffermengsels	6
2.4	Amfolieten	6
2.5	Titraties	6
2.5.1	Sterk zuur met een sterke base	6
2.5.2	Zwakke base met sterk zuur of Zwak zuur met sterke base	6
3	Elektrochemie	8
3.1	Batterij	8
3.2	Elektrolysecel	8
4	Chemische Kinetica	9
5	Fasenleer	11
A	Appendix: Referenties	12
A.1	Periodiek Systeem	12
A.2	Fysische constanten	13
A.3	Protolyseconstanten bij 25°C	13
A.4	Basiciteitsconstanten bij 25°C	13
A.5	Standaardredoxpotentialen bij 25°C	13
A.6	Oplosbaarheidsproducten	13
A.7	Redoxhalfreacties opstellen	13
B	Appendix: Nomenclatuur	14
B.1	Anorganische Naamgeving	14
B.2	Organische Naamgeving	15

1 Chemische Thermodynamica

Tekenconventie voor energie-overdracht

systeem \rightarrow buitenwereld

systeem \leftarrow buitenwereld

Standaardomstandigheden

	$T = 298 \text{ K} = 25^\circ \text{ C}$
gas	$p = 1 \text{ atm}$
vloeistof	$c = 1 \text{ M}$
vaste stof	$n = 1 \text{ mol}$
vloeistof/vloeistof	zuivere toestand
elementen	$\Delta G_{\text{vorming}}^0 = 0$
	$\Delta H_{\text{vorming}}^0 = 0$

Inwendige Energie

$$\Delta U = U_{\text{eind}} - U_{\text{begin}} = q + w$$

Arbeid door samendrukking/uitzetting

$$w = p\Delta V$$

Warmte

$$q = \int_{T_{\text{begin}}}^{T_{\text{eind}}} C \, dT$$

1.1 Enthalpie

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(pV)$$

Bij constant volume:

$$\Delta U = q_V$$

Bij constante druk:

$$\Delta H = q + w + \Delta(pV) = q_p$$

Vrije enthalpie/Enthalpie van Gibbs G Enthalpie die bruikbaar is om arbeid te verrichten

$$\Delta G = \Delta H - \Delta(TS)$$

1.1.1 Wet van Hess

Wet van Hess: De reactie-enthalpie is de som van de vormingsenthalpiën van de reactieproducten min de vormingsenthalpiën van de uitgangsstoffen. De reactie-enthalpie is onafhankelijk van de gevolgde reactieweg.

$$\Delta H_{\text{reactie}}^0 = \sum \alpha \Delta H_{\text{vorming}}^0(\text{reactieproducten}) - \sum \alpha \Delta H_{\text{vorming}}^0(\text{uitgangsstoffen})$$

1.2 Entropie

$$\Delta S = \frac{q}{T}$$

geïsoleerd systeem	$\Delta S_{\text{systeem}} > 0$	onomkeerbaar
	$\Delta S_{\text{systeem}} = 0$	omkeerbaar
open/gesloten systeem	$\Delta S_{\text{heelal}} = \Delta S_{\text{systeem}} + \Delta S_{\text{buitenwereld}} > 0$	onomkeerbaar
	$\Delta S_{\text{heelal}} = \Delta S_{\text{systeem}} + \Delta S_{\text{buitenwereld}} = 0$	omkeerbaar

1.3 Chemische Evenwichten

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln Q_p$$

$$Q_p = \prod \left(\frac{p_i}{p_i^{\text{std}}} \right)^{\nu_i} \quad \text{met } \nu_i > 0 \text{ stoichiometrische coëfficiënten voor de reactieproducten}$$

$$Q_p^e = K_p$$

$$Q_c = \prod \left(\frac{c_i}{c_i^{\text{std}}} \right)^{\nu_i} \quad \text{met } \nu_i > 0 \text{ stoichiometrische coëfficiënten voor de reactieproducten}$$

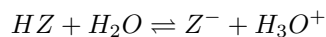
$$Q_c^e = K_c$$

1.3.1 Wet van Le Châtelier

Wet van Le Châtelier: Wanneer een soring wordt aangebracht op een chemisch evenwicht, zal dit evenwicht zo verschuiven worden dat de verstoring tegengewerkt wordt

2 Zuur-Base-evenwichten

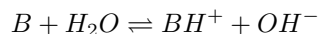
Aciditeitsconstante



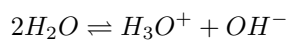
$$K_A = K_a = K_Z = \frac{[H_3O^+]_e [Z^-]_e}{[HZ]_e}$$

Basiciteitsconstante

$$K_B = K_b = \frac{[BH^+]_e [OH^-]_e}{[B]_e}$$

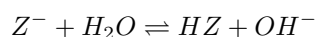
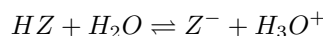


Autoprotolyseconstante (ion-product)



$$K_W = [H_3O^+]_e [OH^-]_e = 1,0 \cdot 10^{-14} \quad \text{bij } 25^\circ \text{C}$$

Relatie tussen Aciditeitsconstante en Basiciteitsconstante Voor een zuur en zijn geconjugeerde base of voor een base en zijn geconjugeerd zuur geldt:



$$K_A K_B = K_W$$

p-schalen

$$\text{pH} = -\log [H_3O^+]_e$$

$$\text{pOH} = -\log [OH^-]_e$$

$$\text{pK}_A = -\log K_A$$

$$\text{pK}_B = -\log K_B$$

$$\text{pK}_W = -\log K_W = \text{pK}_A + \text{pK}_B = \text{pH} + \text{pOH} = 14,0 \quad \text{bij } 25^\circ \text{C}$$

Protolysegraad

$$\alpha = \frac{[HZ]_0 - [HZ]_e}{[HZ]_0} = \frac{[H_3O^+]_e - [H_3O^+]_0}{[HZ]_0} = \frac{[H_3O^+]_e}{z_0}$$

$$\beta = \frac{[B]_0 - [B]_e}{[B]_0} = \frac{[OH^-]_e - [OH^-]_0}{[B]_0} = \frac{[OH^-]_e}{b_0}$$

2.1 Classificatie van zuren/basen

zuur	$10 \leq K_A$	sterk zwak verwaarloosbaar	$10 \leq K_B$	base
	$10^{-10} \leq K_A \leq 10^{-4}$		$10^{-10} \leq K_B \leq 10^{-4}$	
	$K_A \leq 10^{-10}$		$K_B \leq 10^{-10}$	

2.2 pH-berekening

Eigenschap	Formule
Sterk zuur	$\text{pH} = -\log [Z]_0$
Sterke base	$\text{pH} = 14 + \log [B]_0$
Zwak zuur	$\text{pH} = \frac{1}{2} (\text{pK}_A - \log [Z]_0)$
Zwakke base	$\text{pH} = 7 + \frac{1}{2} (\text{pK}_A + \log [B]_0)$
Buffermengsel	$\text{pH} = \text{pK}_A + \log \frac{[B]_0}{[Z]_0}$
Zout: sterk zuur + sterke base	$\text{pH} = 7$
Zout: sterk zuur + zwakke base	$\text{pH} = 7 + \frac{1}{2} (\text{pK}_A + \log [\text{zout}]_0)$
Zout: zwak zuur + sterke base	$\text{pH} = 7 + \frac{1}{2} (\text{pK}_B - \log [\text{zout}]_0)$
Zout: zwak zuur + zwakke base	$\text{pH} = 7 + \frac{1}{2} (\text{pK}_A - \text{pK}_B)$

2.3 Buffermengsels

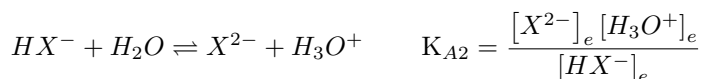
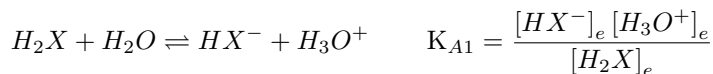
buffer: mengsel van een geconcentreerd zwak zuur en zijn geconcentreerde zwakke base voorwaarden

- Vergelijkbaar zwk zuur en vergelijkbaar zwakke base ($K_A \approx K_B$: allebei zwak)
- Allebei in hoge concentratie ($b_0, z_0 \geq 1 \cdot 10^{-2} \text{ M}$)
- Protolysegraad van het zuur en de base is zeer klein ($\alpha, \beta < 1$ à 2%)

Formule van Henderson-Hasselbalch (enkel geldig in een buffer)

$$\text{pH} = \text{pK}_A + \log \frac{[B]_0}{[BH^+]_0} = \text{pK}_A + \log \frac{b_0}{z_0}$$

2.4 Amfolieten



$$\text{pH} = \frac{1}{2} (\text{pK}_{A1} + \text{pK}_{A2})$$

2.5 Titraties

2.5.1 Sterk zuur met een sterke base

Zure startoplossing

Voor het equivalentiepunt

Tijdens het equivqlentiepunt

Na het equivalentiepunt

2.5.2 Zwakke base met sterk zuur of Zwak zuur met sterke base

Zure startoplossing

Voor het equivalentiepunt Neutralisatiegraad

$$\Theta = \frac{xb}{Va}$$

$$1 - \Theta = 1 - \frac{xb}{Va} = \frac{Va - xb}{Va}$$

$$\text{pH} = \text{pK}_A + \log \frac{xb}{Va - xb} = \text{pK}_A + \log \frac{\Theta}{1 - \Theta}$$

Tijdens het equivalentiepunt licht basis karakter ($\text{pH} \neq 7,0$)

Na het equivalentiepunt

3 Elektrochemie

3.1 Batterij

Elektromotorische kracht

$$\Delta E = -\frac{\Delta G}{nF}$$

Uitwendig bruikbare spanning

$$V = \Delta E - IR_{\text{inwendig, batterij}}$$

Elektromotorische kracht van niet-standaardreactie

$$\Delta E = \Delta E^0 - \frac{RT}{nF} \ln Q_c$$

$$\Delta E = \Delta E^0 - \frac{RT}{nF} \ln 10 \log Q_c \approx \Delta E^0 - 0,0592 \log Q_c$$

Evenwichtsconstante

$$K_c = e^{\left(\frac{nF\Delta E^0}{RT}\right)}$$

$$\Delta E^0 = \frac{RT}{nF} \ln K_c$$

Vergelijkingen van Nernst

$$\Delta E = E_{\text{kat}} - E_{\text{an}}$$

Uitschrijven en groeperen per redoxpaar, concentraties op een breuk zetten in de logaritme.

3.2 Elektrolysecel

Overspanning

$$U = V - \Delta E$$

Overgedragen lading

$$q = it$$

$$n_{e^-} = \frac{q}{F}$$

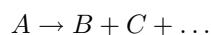
$$m_{\text{elkp}} = \frac{M_{\text{elkp}} it}{nF}$$

4 Chemische Kinetica

Snelheid voor een enkelvoudig reactiepad of samengesteld reactiepad met stationariteit

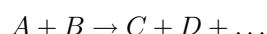
$$s = \frac{1}{\nu_i} \frac{d[X_i]}{dt} \quad \text{met } \nu_i \text{ de stoichiometrische coëfficiënt } (< 0 \text{ voor de uitgangsstoffen})$$

Monomoleculair reactiepad



$$s = -\frac{d[A]}{dt} = k[A]$$

Bimoleculair reactiepad



$$s = \frac{-d[A]}{dt} = \frac{-d[B]}{dt} = k[A][B]$$

Halveringstijd

$$[A]_{t=t_{1/2}} = \frac{[A]_0}{2}$$

$$[A]_{t=t_{1/f}} = \frac{[A]_0}{f}$$

Bij een eerste-orde-reactie:

$$t_{1/f} = \frac{\ln f}{k}$$

$$\frac{t_{1/f}}{t_{1/g}} = \frac{\ln f}{\ln g}$$

Bij een n -de-orde-reactie:

$$t_{1/f} = \frac{f^{n-1} - 1}{[A]_0^{n-1} (n-1) k}$$

$$\frac{t_{1/f}}{t_{1/g}} = \frac{f^{n-1} - 1}{g^{n-1} - 1}$$

De verhouding tussen twee delingstijden is typerend voor de reactieorde.

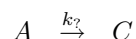
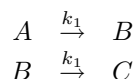
Eerste-orde-reactie:

$$[A]_t = [A]_0 e^{-kt}$$

Tweede-orde-reactie:

$$\frac{1}{[A]_t} = \frac{1}{[A]_0} + kt$$

Stationariteit



$$\frac{d[B]}{dt} \approx 0 \Leftrightarrow [B] \ll [A] \text{ én } [B] \ll [C]$$

Activeringsenergie van Arrhenius

$$k = Ae^{\frac{-E}{RT}}$$

Activeringsenthalpie van Eyring

$$k = \frac{\kappa T}{h} e^{\frac{-\Delta G^\ddagger}{R}}$$

$$\Delta G^\ddagger = \Delta H^\ddagger - T\Delta S^\ddagger$$

5 Fasenleer

Faseregel van Gibbs

$$V_r = c + 2 - f$$

- V_r : het aantal vrijheidsgraden
- c : het aantal onafhankelijke componenten in het systeem
- 2: de vrijheidsgraden: druk en temperatuur
- f : het aantal fasen in evenwicht in het systeem

Claapeyron-Clausius: temperatuursafhankelijkheid van de dampdruk

$$p_i^0(T) = B e^{-\frac{\Delta H_{\text{verd}}}{RT}}$$

Gebruiksvoorwaarden en symbolen

- Enkel toepasbaar bij ideale gassen, dus niet rond de kritische temperatuur bruikbaar
- ΔH_{verd} wordt vaak vervangen door ΔH_{verd}^0 , dit is enkel toepasbaar als de temperatuur niet veel afwijkt van de kamertemperatuur (tot 50°C)!
- B is een constante die karakteristiek is voor de stof i

Molaliteit

$$m_B = \frac{\text{mol opgeloste stof } B}{1000 \text{ g oplosmiddel } A}$$

Wet van Raoult

$$p_A = p_A^0 x_A$$

Dampdrukswijziging

$$\Delta p_A = p_A^0 x_B = \frac{p_A^0 M_A}{1000} m_b = K_A m_B$$

Kooktemperatuurswijziging

$$\Delta T_A^K = K_A^K m_B$$

Stoltemperatuurswijziging

$$\Delta T_A^S = K_A^S m_B$$

Osmotische druk

$$p_{\text{osm}} = \pi = [B] RT = \frac{m_B}{M_B} RT$$

A Appendix: Referenties

A.1 Periodiek Systeem

1

18

1

H

hydrogen

1.007 94(7)

2

He

helium

4.002 602(2)

3

Li

lithium

6.941(2)

4

Be

beryllium

9.012 182(3)

11

Na

sodium

22.989 770(2)

12

Mg

magnesium

24.3050(6)

19

K

potassium

39.0983(1)

20

Ca

calcium

40.078(4)

37

Rb

rubidium

85.468(3)

38

Sr

strontium

87.62(1)

55

Cs

caesium

132.905 45(2)

56

Ba

barium

137.327(7)

87

Fr

francium

[223.0197]

88

Ra

radium

[226.0254]

89-103

actinoids

57

La

lanthanum

138.905(2)

58

Ce

cerium

140.116(1)

59

Pr

praseodymium

140.907 55(2)

60

Nd

neodymium

144.24(3)

61

Pm

promethium

[144.9127]

62

Sm

samarium

150.36(3)

63

Eu

europium

151.964(1)

64

Gd

gadolinium

157.25(3)

65

Tb

terbium

158.925 34(2)

66

Dy

dysprosium

162.500(1)

67

Ho

holmium

164.930 32(2)

68

Er

erbium

167.259(3)

69

Tm

thulium

168.934 21(2)

70

Yb

ytterbium

173.04(3)

71

Lu

lutetium

174.967(1)

89

Ac

actinium

[227.0277]

90

Th

thorium

[232.0381(1)]

91

Pa

protactinium

[231.035 88(2)]

92

U

uranium

[238.028 91(3)]

93

Np

neptunium

[237.0482]

94

Pu

plutonium

[244.0642]

95

Am

americium

[243.0614]

96

Cm

curium

[247.0704]

97

Bk

berkelium

[247.0703]

98

Cf

californium

[251.0796]

99

Es

einsteinium

[252.0859]

100

Fm

fermium

[257.0961]

101

Md

mendelevium

[258.0984]

102

No

nobelium

[259.1010]

103

Lr

lawrencium

[262.1097]

Key:

atomic number
Symbol
name
standard atomic weight

IUPAC Periodic Table of the Elements

Notes

- 'Aluminium' and 'caesium' are commonly used alternative spellings for 'aluminum' and 'caesum'.

- IUPAC 2001 standard atomic weights (mean relative atomic masses) are listed with uncertainties in the last figure in parentheses [R. D. Loss, *Pure Appl. Chem.* 75, 1107-1122 (2003)]. These values correspond to current best knowledge of the elements in natural terrestrial sources. For elements with no IUPAC assigned standard value, the atomic mass (in unified atomic mass units) or the mass number of the nuclide with the longest known half-life is listed between square brackets.

- Elements with atomic numbers 112, 113, 114, 115, and 116 have been reported but not fully authenticated.

Copyright © 2004 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry. For updates to this table, see http://www.iupac.org/reports/periodic_table/. This version is dated 1 November 2004.

A.2 Fysische constanten

Naam	Symbool	Waarde	Eenheden
Lading elektron	e	$1,6021 \cdot 10^{-19}$	C
Constante van Planck	h	$6,6252 \cdot 10^{-34}$	J s
Lichtsnelheid	c	$2,99793 \cdot 10^{+08}$	m s ⁻¹
Massa van een elektron	m_e	$9,1083 \cdot 10^{-31}$	kg
Massa van een proton	m_p	$1,67239 \cdot 10^{-27}$	kg
Massa van een neutron	m_n	$1,67470 \cdot 10^{-27}$	kg
Getal van Avogadro	N_A	$6,0226 \cdot 10^{+23}$	mol ⁻¹
Ideale gasconstante	R	8,314	J K ⁻¹ mol ⁻¹
		0,0820	l atm K ⁻¹ mol ⁻¹
		1,987	cal K ⁻¹ mol ⁻¹
Constante van Boltzmann	κ	$1,3805 \cdot 10^{-23}$	J K ⁻¹
Constante van Faraday	F	96,487	C mol ⁻¹
Bohrstraal	a_0	$5,2917 \cdot 10^{-27}$	m
Valversnelling	g	9,81	m s ⁻²
Correctiefactor 0001	$\frac{RT}{F} \ln 10$	0,0592	

A.3 Protolyseconstanten bij 25°C

..

A.4 Basiciteitsconstanten bij 25°C

..

A.5 Standaardredoxpotentialen bij 25°C

..

A.6 Oplosbaarheidsproducten

..

A.7 Redoxhalfreacties opstellen

naar STEFAN SANDKER

1. Begin met het redoxkoppel. Dit koppel moet bekend zijn, dus het moet expliciet in de opgave vermeld staan. Soms zul je uit de gegevens in de opgave moeten afleiden wat het koppel is, dus dan is het koppel impliciet gegeven.
2. **Massabalans:**
 - (a) Balanceer alle elementen behalve O en H
 - (b) Balanceer O door het juiste aantal H_2O aan te vullen.
 - (c) Balanceer H door het juiste aantal H^+ in te vullen. Eigenlijk zou je H_3O^+ moet invullen, maar in de praktijk is het gebruikelijk in redoxreacties H^+ in te vullen.
3. **Ladingenbalans:** Balanceer de lading door het juiste aantal e^- in te vullen. Dit is overigens ook in "gewone" reacties belangrijk: bij het kloppend maken van een reactievergelijking moet je niet alleen de elementen kloppend maken, maar er ook altijd voor zorgen dat de lading kloppend is! In een reactievergelijking kan dat natuurlijk niet door elektronen in te vullen.
4. Als je bij het kloppend maken links H^+ -ionen hebt ingevuld, maar uit de opgave blijkt dat de oplossing niet zuur is, dan moeten deze ionen verdwijnen. Dat doe je door het juiste aantal OH^- toe te voegen: links ontstaat dan H_2O , rechts komen OH^- -ionen te staan. Het is ook mogelijk dat je bij het kloppend maken rechts H^+ -ionen hebt ingevuld, terwijl uit de opgave blijkt dat dit niet correct is. Ook dan laat je de H^+ -ionen "verdwijnen" door links en rechts het juiste aantal OH^- -ionen toe te voegen.
5. Controleer of tussen de deeltjes een zuur-base reactie of een neerslagreactie ontstaat.
6. **Vereenvoudig de halfreactie:** als je een deeltje links én rechts ziet staan, moet je het wegstrepen.

B Appendix: Nomenclatuur

B.1 Anorganische Naamgeving

Ionen

- Éénatomige kationen X^{p+}
- Éénatomige anionen X^{p-}
- Enkelvoudige meeratomige anionen X_n^{p-}
- Complexe anionen die zuurstof bevatten XO_n^{p-}
- Complexe anionen die zuurstof en waterstof bevatten $H_qXO_n^{q-p}$

Enkelvoudige stoffen x

-

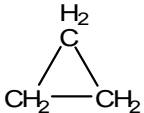
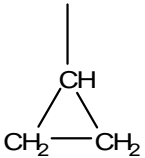
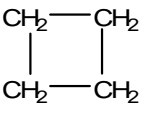

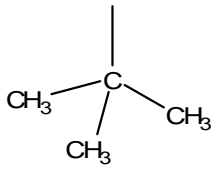
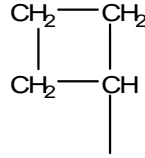
Binair samengestelde stoffen x

-

Oxyzuren x en ageleide zouten x

-

B.2 Organische Naamgeving

n	RH	naam	R-	naam
1	CH ₄	methaan	CH ₃ -	methyl
2	CH ₃ CH ₃	ethaan	CH ₃ CH ₂ -	ethyl
3	CH ₃ CH ₂ CH ₃ 	propaan <i>cyclo</i> propaan	CH ₃ CH ₂ CH ₂ - 	propyl <i>cyclo</i> propyl
4	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₃ (CH ₃) ₂ CHCH ₃ 	butaan <i>iso</i> butaan <i>cyclo</i> butaan	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -  (CH ₃) ₂ CHCH ₂ -  	<i>n</i> -butyl <i>sec</i> -butyl <i>iso</i> -butyl <i>tert</i> -butyl <i>cyclo</i> butyl

Regel 1

De langste (hoofd)keten wordt genummerd van het ene naar het andere uiteinde met Arabische cijfers. Die nummering dient om de plaats van substituenten op de hoofdketen aan te duiden. Dit hoeft enkel te gebeuren indien de plaats van de substituant niet op éénduidige wijze kan gedefinieerd worden.

Regel 2

Voor de plaatsaanduiding van meerder, identieke, niet samengestelde substituenten, worden passende numerieke voorvoegsels, **di-**, **tri-**, **tetra-**, **penta-**, **hexa-**, enz..., angewend.

Regel 3

De hoofdketen wordt steeds gedefinieerd als de langst mogelijk lineaire keten, en op dusdanige wijze dat de substituenten dan wel de laagst mogelijke plaatsnummers toegewezen krijgen. Een reeks plaatsnummers wordt als lager dan een andere beschouwd wanneer bij het eerst optredend verschil tussen de twee reeksen het kleinste getal staat.

Regel 4

Indien twee of meerdere verschillende substituanten (zijketens) aanwezig zijn, worden ze **alfabetisch** gerangschikt met hun respectievelijk plaatsnummer; wanneer bij gelijke reeks van plaatsnummers nog steeds keuze mogelijk is, wordt het laagste plaatsnummer toegewezen aan de substituant waarvan de eerste naamletter ook als eerste voorkomt in het alfabet.

Regel 5

Radicalen of substituanten afgeleid uit alkanen worden vernoemd door namen van kleinere substituanten als voorvoegsel te hechten aan de naam van het langste niet vertakt radicaal dat als hoofdketen fungeert. Hierbij geldt **zonder uitzondering** dat het koolstofatoom die de vrije valentie (of het ongepaard elektron) draag (of aan een andere hoofdketen gebonden wordt) steeds plaatsnummer **1** toegewezen krijgt.

Regel 6

Zoals eerder gesteld in regel 2, gebruikt men voor de aanduiding van meerdere gelijke **enkelvoudige** substituanten de numerieke voorvoegsels **di, tri, tetra, penta, hexa...**enz. Echter, voor de aanduiding van meerdere gelijke **samengestelde** substituanten gebruikt men de numerieke voorvoegsels **bis, tris, tetrakis, pentakis, hexakis...**enz.

Regel 7

Het achtervoegsel “**aan**” wordt vervangen door

“ een ”	om	1 dubbele C=C binding
“ adien ”	om	2 dubbele C=C bindingen
“ atrien ”	om	3 dubbele C=C bindingen
enz.		

aan te duiden in de hoofdketen van een **onverzadigde** koolwaterstof.

Regel 8

De hoofdketen wordt zodanig genummerd dat de dubbele bindingen de laagst mogelijke plaatsnummers toegewezen krijgen. De hoofdketen is steeds deze met het hoogst aantal dubbele C=C bindingen, zelfs als er een andere lineaire keten met een hoger aantal C-atomen maar zonder dubbele C=C bindingen kan gevonden worden. Plaatsnummers van dubbele bindingen verwijzen naar de positie van bindingen eerder dan van atomen.

Regel 9

Het achtervoegsel “**aan**” wordt vervangen door

“ yn ”	om	1 triple C≡C binding	(alkyn)
“ adiyn ”	om	2 triple C≡C bindingen	(alkadiyn)
“ enyn ”	om	1 dubbele C=C en 1 triple C≡C binding	(alkenyn)
“ diëny ”	om	2 dubbele C=C en 1 triple C≡C bindingen	(alkadiëny)
“ eendiyn ”	om	1 dubbele C=C en 2 triple C≡C bindingen	(alkeendiyn)
enz...			

aan te duiden in de hoofdketen van een **onverzadigde** koolwaterstof.

Regel 10

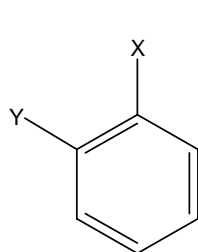
De meervoudige bindingen krijgen de laagst mogelijk plaatsnummers in de hoofdketen, voor zover plaatsaanduiding onontbeerlijk is.

Regel 11

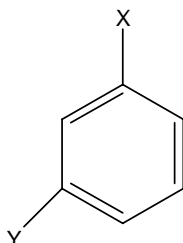
Indien in eenzelfde molecule twee gelijkwaardige plaatsnummering mogelijkheden naar voren komen voor de plaatsnummering van een dubbele en een triple binding, dan wordt steeds het laagste plaatsnummer toegewezen aan de dubbele eerder dan aan de triple binding.

Regel 12

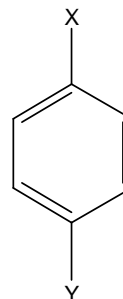
De plaats van substituanten op aromatische ringsystemen, m.i.v. gesubstitueerde benzeenderivaten, worden aangeduid met plaatsnummers. Bij **digesubstitueerde** benzeenderivaten, d.w.z. benzeenringen met twee substituanten, mag men ook **ortho (o)**, **meta (m)** en **para (p)** gebruiken om respectievelijk **1,2-**, **1,3-** en **1,4-** substitutiepatronen aan te duiden.



ortho
1,2-disubstitutie



meta
1,3-disubstitutie



para
1,4-disubstitutie

Koolwaterstofachtige substituanten R, van de gedaante C_xH_y , kunnen van tweeërlei aard zijn, **alifatisch** of **aromatisch**. Ze zijn **aromatisch** als de substitutieplaats in de substituant een koolstofatoom is van een aromatisch systeem. Zulke substituanten worden **aryl** groepen genoemd, en worden vaak voorgesteld als **Ar**. De fenyl groep, C_6H_5- , is een voorbeeld van **aryl** groep. In alle andere gevallen zijn de C_xH_y substituanten **alifatisch**, en gaat het om alkyl, alkenyl of alkynyl groepen, naargelang het C-atoom op de substitutieplaats in de substituant respectievelijk **sp³**, **sp²** of **sp** gehybridiseerd is, in welk geval ze eerder voorgesteld worden als **R**.

Bij de **substitutieve** nomenclatuur worden karakteristieke functionele groepen weergegeven als **voorvoegsel** of **achtervoegsel** toegevoegd aan de naam van een **stamverbinding** die deze groepen niet bevat.

Bij de **radicofunctionele** nomenclatuur worden functionele groepen aangeduid met **achtervoegsels** die gehecht worden aan de naam van het radicaal of de substituant die aan die functionele groep gebonden is.

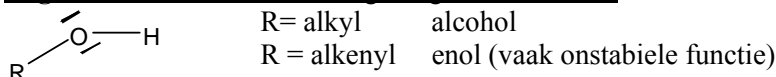
Regel 13 – substitutieve naamgeving van organische halogeniden

R-X	X = F, Cl, Br, I	R = alkyl, alkenyl, alkynyl	alifatisch halogenide
Ar-X	X = F, Cl, Br, I	R = aryl	aromatisch halogenide

Een halogenide R-X wordt in de substitutieve nomenclatuur vernoemd door de voorvoegsels **“fluor”**, **“chlor”**, **“broom”**, **“jood”** te plaatsen vóór de naam van de verbinding, met, indien nodig, een nummer om de plaats van het halogeen op de hoofdketen aan te duiden.

Regel 14 – radicofunctionele naamgeving van organische halogeniden

Radicofunctionele namen van halogeniden worden voortgebracht door de functionele klassenaam **“fluoride”**, **“chloride”**, **“bromide”**, **“jodide”** te plaatsen achter de naam van een radicaal. Dit type naamgeving wordt enkel gebruikt met **enkelvoudige** substituanten, **niet** met **samengestelde** substituanten.

Regel 15 – substitutieve naamgeving van alcoholen

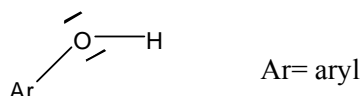
De hydroxylgroep (OH) wordt als hoofdgroep aangeduid in de substitutieve naamgeving van alcoholen door het voorvoegsel “ol” te hechten aan de naam van de stamverbinding met, indien nodig, een nummer om de plaats van de hydroxylgroep op de hoofdketen aan te duiden.

Regel 16 – meer over substitutieve naamgeving van alcoholen

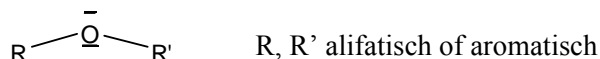
Hydroxyl groepen, d.w.z. alcoholfuncties worden als substituant aangeduid met het voorvoegsel “hydroxy” indien een andere functionele groep met voorrang voor gebruik als hoofdgroep aanwezig is, of indien een hydroxyl groep voorkomt in een zijketen. De voorrang regels bij functionele groepen zijn als volgt: carboxzuren > carboxzuurderivaten > ketonen > aldehyden > alcoholen > ethers > aminen > hologeniden.

Regel 17 – radicofunctionele naamgeving van alcoholen

Radicofunctionele namen van alcoholen worden verkregen door de term “**alcohol**” te voegen aan de naam van een radicaal of substituant. Ook hier wordt dit type naamgeving enkel gebruikt met **enkelvoudige** substituanten, **niet** met **samengestelde** substituanten.

Regel 18 –naamgeving van fenolen

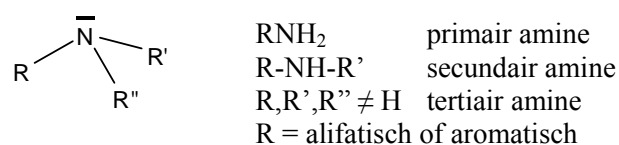
De naam van hydroxyderivaten van benzeen, fenolen dus, wordt gevormd door de uitgang “ol”, “diol”, enz... te voegen aan de naam van de aromatische stamverbinding. Bij aanwezigheid van andere voorrang genietende functionele groepen geldt regel 16.

Regel 19 – substitutieve naamgeving van ethers

De naam van ethers, R-O-R' wordt in de substitutieve naamgeving gevormd door de naam van de substituant RO- toe te voegen aan de naam van de koolwaterstof waaruit de tweede substituant R' afgeleid is. De ether substituant die dienst doet als stamkoolwaterstof is doorgaans deze met de langste hoofdketen, of, desgevallend, deze die een andere voorrang hebbende functionele groep bevat. Is R- een alkyl groep, dan is RO- een akoxagroep.

Regel 20 – radicofunctionele naamgeving van ethers

De naam van ethers, R-O-R' wordt in de radicofunctionele naamgeving voortgebracht door aan de naam van de twee substituanten R en R', alfabetisch gerangschikt, de term “**ether**” toe te voegen.

Aminen

Regel 21 – radicofunctionele naamgeving van primaire aminen

De naam van primaire aminen, $R-NH_2$, worden in de radicofunctionele naamgeving voortgebracht door aan de naam van de substituant, de term “**amine**” toe te voegen, met desgevallend, de nodige plaatsnummers.

Regel 22 – substitutieve naamgeving van primaire aminen en polyaminen

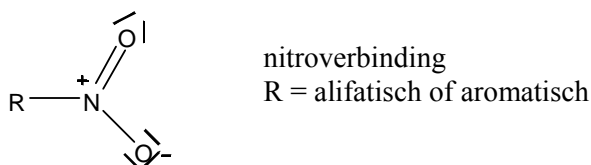
De naam van primaire aminen of polyaminen worden in de substitutieve naamgeving voortgebracht door het achtervoegsel “**amine**”, “**diamine**”, “**triamine**”, ..., toe te voegen aan de naam van de stamverbinding, met desgevallend, de nodige plaatsnummers. Als alternatief kan ook de naam van de stamverbinding voorafgegaan worden door het voorvoegsel “**amino**”, “**diamino**”, “**triamino**”...

Regel 23 – meer over substitutieve naamgeving van primaire aminen en polyaminen

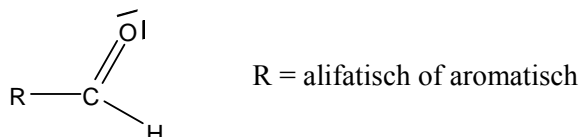
Amino groepen worden als substituant aangeduid met het voorvoegsel “**amino**” indien een andere functionele groep met voorrang voor gebruik als hoofdgroep aanwezig is, of indien een amino groep voorkomt in een zijketen.

Regel 24– naamgeving van secundaire en tertiaire aminen

Secundaire en **tertiaire aminen** worden vernoemd als N-substitutieproducten van primaire aminen. De meest complexe substituant wordt gekozen als stam dienende primaire amine.

Regel 25 – naamgeving van nitroderivaten

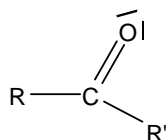
Nitroderivaten worden vernoemd door de nitrofunctie aan te duiden met het voorvoegsel “**nitro**” vóór de naam van de stamverbinding.

Regel 26 – naamgeving van aldehyden

De naam van een aldehyde wordt gevormd door de uitgang “**al**” te voegen aan de naam van de koolwaterstof met hetzelfde aantal koolstofatomen die als stamverbinding dient.

Regel 27 – meer over de naamgeving van aldehyden

Indien een aldehydefunctie voorkomt als zijketen van een stamverbinding die hetzij aldehydefuncties, hetzij andere voorrang hebbende functionele groepen bevat, of die cyclisch is, wordt deze groep als substituant van de hoofdketen aangeduid met het voorvoegsel “**formyl**”.

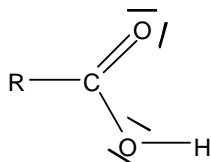
Regel 28 – naamgeving van ketonen

R, R' = alifatisch of aromatisch

De naam van een keton wordt gevormd door de uitgang “**on**” te voegen aan de naam van de koolwaterstof met hetzelfde aantal koolstofatomen die als stamverbinding dient. Waar nodig wordt de positie van de carbonyl groep, C=O, aangeduid met een plaatsnummer. Plaatsnummers van carbonylgroepen krijgen voorrang op plaatsnummers van meervoudige bindingen.

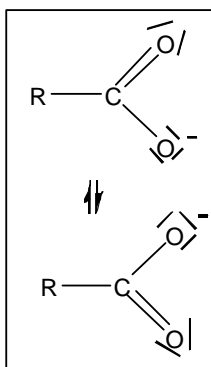
Regel 29 – meer over naamgeving van aldehyden en ketonen

Een aldehyde of ketongroep wordt aangeduid met het voorvoegsel “**oxo**” indien een andere voorrang hebbende functionele groep aanwezig is.

Regel 30 – naamgeving van carbonzuren en carbonzuurderivaten

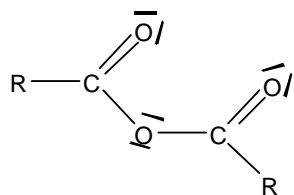
carbonzuur

R = H, alifatisch of aromatisch



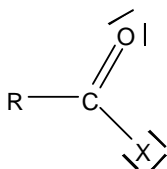
carboxylaatanion

R = H, alifatisch of aromatisch



carbonzuur anhydride

R = H, alifatisch of aromatisch



carbonzuur halogenide

R = H, alifatisch of aromatisch

C=O

carbonylgroep

R-C≡N|

nitril

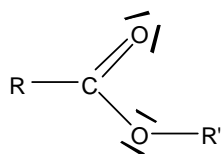
R = alifatisch of aromatisch

De naam van een **carbonzuur**, **R-COOH**, van een geconjugeerde base van een carbonzuur, een **carboxylaatanion** **R-COO⁽⁻⁾**, van een **zuur halogenide**, **R-COX**, van een **primair amide**, **R-CONH₂**, en van een **nitril**, **R-C≡N**, wordt bekomen door aan de naam van de koolwaterstof **R-H**, die als stamverbinding gekozen wordt, respectievelijk de achtervoegsels “**carbonzuur**”, “**carboxyla**”, “**carbonylhalogenide**”, “**carbonamide**” en “**carbonitril**” te voegen. Bij deze bijzondere naamgeving wordt het koolstofatoom van de carboxylgroep in al deze organische functies **nooit** meegeteld in de nummering van de hoofdketen van voornoemde stamverbinding. Carbonzuren hebben de hoogste voorrang onder de organische functies, hier onmiddellijk in gevolgd door de carbonzuurderivaten.

R-	R-COOH	R-COO ⁽⁻⁾	R-COX	R-CONH ₂	R-CN
H-	mierenzuur	formia at	formyl halogenide	formam ide	formonitril
CH ₃ -	azijnzuur	aceta at	acetyl halogenide	acetam ide	acetonitril
CH ₃ CH ₂ -	propionzuur	propiona at	propionyl halogenide	propionam ide	propionitril
CH ₃ CH ₂ CH ₂ -	boterzuur	butyra at	butyryl halogenide	butyram ide	butyronitril
C ₆ H ₅ -	benzoëzuur	benzoa at	benzoyl halogenide	benzam ide	benzonitril

In bovenstaande gevallen van eigennamen, wanneer deze gebruikt worden als stamverbindingen bij verdere invoering van substituanten, begint de ketenummering wél bij het koolstofatoom van de carboxylgroep (COO⁻) (behalve uiteraard bij benzoëzuur waar de carboxylgroep COOH sowieso een zijketen vormt van de benzeenring).

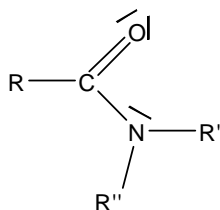
Regel 31 – naamgeving van esters



R = H, alifatisch of aromatisch
R' = alifatisch of aromatisch

De naam van een **ester**, **R-COO-R'**, wordt vernoemd naar de naam van de substituant **R'**, gevolgd door de naam van het carboxyla **R-COO**. Hierbij mag er **geen** koppelteken staan tussen de naam van R' en die van het carboxyla **R-COO**, en moeten de twee namen los van elkaar staan.

Regel 32 – naamgeving van N-gesubstitueerde amiden



R, R', R'' = H, alifatisch of aromatisch amide

R-CO-NH₂
R-CO-NHR'
R-CO-NR'R''

R' ≠ H
R', R'' ≠ H

primair amide
secundair amide
tertiair amide

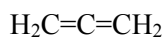
De naam van N-gesubstitueerde amiden $R\text{-CO-NHR'}$ of $R\text{-CO-NR'R''}$ wordt gevormd door de naam van de substituanten op het stikstofatoom met de letter N aan te duiden vóór de naam van het als stam geldende amide $R\text{-CO-NH}_2$.

Regel 33 – meer over de naamgeving van carbonzuurderivaten

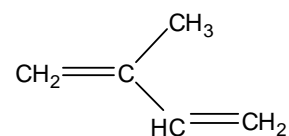
Indien de functionele groep $R\text{-COZ}$ voorkomt in een zijketen of in een verbinding met een andere, voorrang genietende functionele groep, wordt hij als substituant aangeduid vóór de naam van de stamverbinding. De namen van deze als substituanten behandelde functionele groepen worden hieronder weergegeven:

$-\text{COOH}$	carboxy
$-\text{O-CO-R}$	acyloxy (R = koolwaterstofachtige-substituant, C_xH_y)
$-\text{CO-O-R}$	alkylcarboxy
$-\text{CO-O-Ar}$	arylcarboxy
$-\text{C}\equiv\text{N}$	cyaan

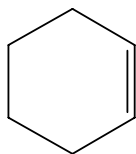
Eigennamen



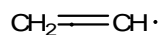
alleen



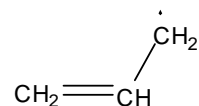
isopreen



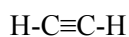
cyclohexeen



vinyl

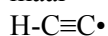


allyl

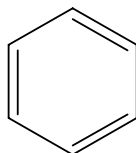


acetyleen

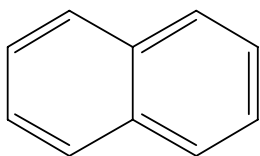
maar



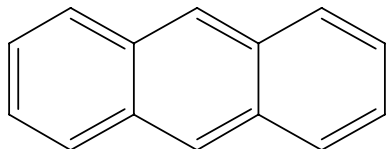
ethynyl



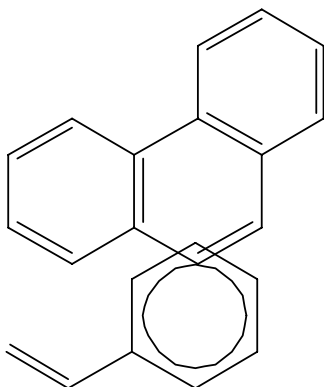
benzeen



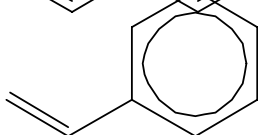
naftaleen



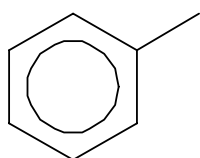
anthraceen



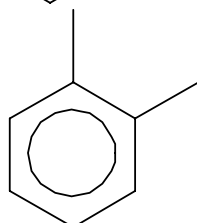
fenantreen



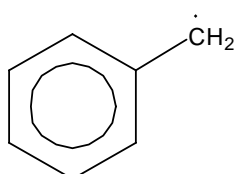
styreen



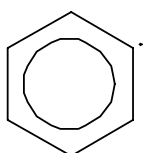
tolueen



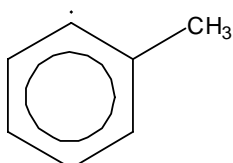
o-xyleen



benzyl



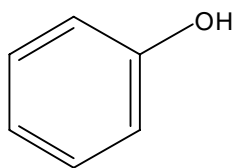
fenyl



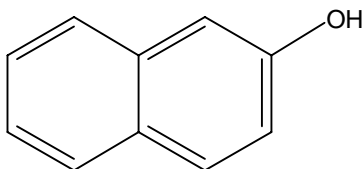
o-tolyl



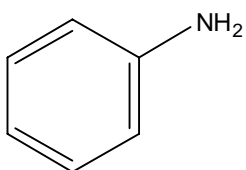
chloroform
koolstoftetrachloride



fenol



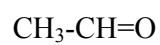
2-naftol



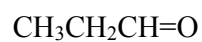
aniline



formaldehyde
(in waterige oplossing: formol)



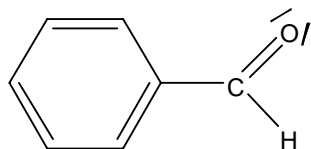
acetaldehyde



propionaldehyde



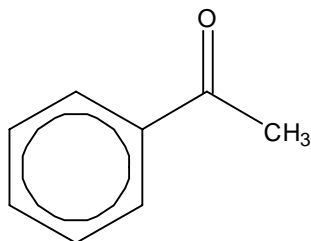
butyraldehyde



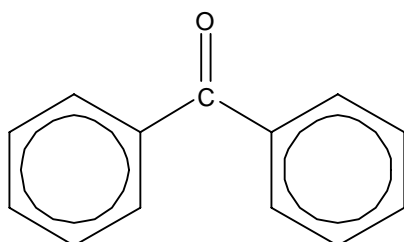
benzaldehyde



aceton



acetofenon



benzofenon