

# Chemische structuren

## Atomen - Inleiding

prof. Zeger Hens | [zeger.hens@ugent.be](mailto:zeger.hens@ugent.be) | [www.nano.ugent.be](http://www.nano.ugent.be)



1

## Atoombouw en atomaire systematiek

### Historische basis

- Klassieke oudheid (5<sup>e</sup> eeuw ADC) – Democritos
- Moderne theorie (na ~1800) – Dalton, Avogadro

1. Materie is samengesteld uit **kleine, ondeelbare partikels** (Gr. “a-tomos”: niet gesneden).
2. De atomen van een gegeven element bezitten **unieke eigenschappen** en **eigen massa**.
3. Atomen zijn **onverwoestbaar** en behouden hun identiteit na een chemische omzetting.
4. De **bouwstenen van zuivere stoffen** worden gevormd wanneer atomen met elkaar **combineren**. Een gegeven verbinding heeft steeds **dezelfde verhouding** van de atomen van de samenstellende elementen.

Merk op – element ≠ atoom

# Atoombouw en atomaire systematiek

## De ideeën van Dalton

- Atoom als fundamentele bouwsteen
- Elementen onderscheiden zich door massa en eigenschappen
  - Relatieve massa's experimenteel toegankelijk
  - 'Eigenschappen' minder éenduidig gedefinieerd, maar vertalen zich in chemische structuren en reactiviteit
- Na Dalton
  - Relatieve massa's / samenstelling enkelvoudige stoffen
  - Systematiek van elementen op basis van eigenschappen
  - Experimentele analyse atomaire structuur
  - Begrijpen van atomaire eigenschappen



3

3

# Atomaire systematiek

## Het periodiek systeem (de tabel van Mendeleev)

### Organisatie van elementen

- Volgens oplopende massa
- Verticale groepen = oplijsting elementen met gelijkaardig chemisch gedrag
- Systematiek herhaalt zich in horizontale perioden

Reihen	Gruppe I.		Gruppe II.		Gruppe III.		Gruppe IV.		Gruppe V.		Gruppe VI.		Gruppe VII.		Gruppe VIII.			
	R <sup>0</sup>	R <sup>-1</sup>	R <sup>0</sup>	R <sup>-1</sup>	R <sup>0</sup>	R <sup>-1</sup>	R <sup>0</sup>	R <sup>-1</sup>	R <sup>0</sup>	R <sup>-1</sup>								
1	H=1																	
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19											
3	Na=23	Mg=24	Al=27,0	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5											
4	K=39	Ca=40	Mg=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59, Ni=59, Cu=63,										
5	(Cu=63)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	Se=78	Br=80											
6	Rb=85	Sr=87	Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	—=100	Ru=104, Rh=104, Pd=106, Ag=108,										
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Te=125	J=127											
8	Ca=133	Ba=137	Dm=138	?Ce=140	—	—	—											
9	(—)	—	—	—	—	—	—											
10	—	—	Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	O=195, Ir=197, Pt=198, Au=199,										
11	(Au=199)	Ilg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—											
12	—	—	—	Th=231	—	U=240	—											

der chemischen Elemente

Opsporen van onbekende elementen / begrijpen van chemisch gedrag van elementen



Zie ook achtergrond op Ufora

4

4

# Atomaire systematiek

## Het periodiek systeem (de tabel van Mendeleev)

Periodic table of the elements																		18		
period	group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	He	
1	1 <sup>+</sup>	H												B	C	N	O	F	He	
2	3	Li	Be											Al	Si	P	S	Cl	Ne	
3	11	Mg												Ge	As	Se	Br	Kr		
4	19	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
5	37	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	55	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	87	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	
lanthanoid series																		Lu		
actinoid series																		Lr		
58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu																				
90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100 101 102 103 Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No																				

\*Numbering system adopted by the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). © Encyclopædia Britannica, Inc.

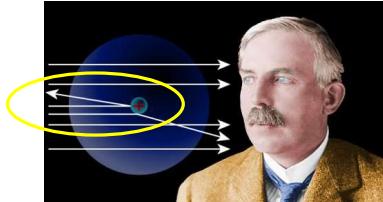
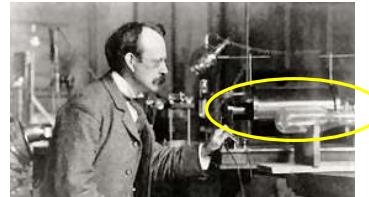


5

5

# Atomaire structuur

- Elektron (1897, Thomson)
  - opvallend licht
  - elektrisch negatief
- Kern (1912, Rutherford)
  - zwaar, compact, positief

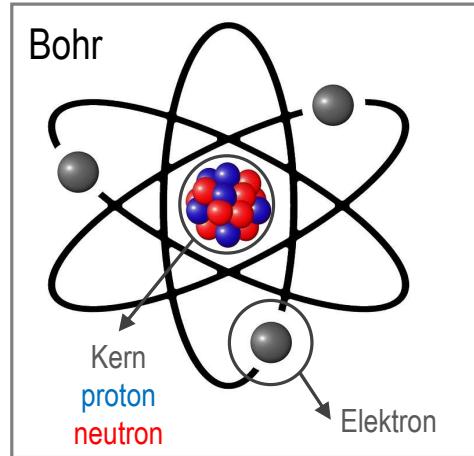


6

3

## Atomaire structuur

- Elektron (1897, Thomson)
  - opvallend licht
  - elektrisch negatief
- Kern (1912, Rutherford)
  - zwaar, compact, positief
  - samengesteld
    - positief proton (1917, Rutherford)
    - neutraal neutron (1932, Chadwick)



Nobelprijs  
1906

Nobelprijs  
1922

Nobelprijs  
1935

7

## Atomaire structuur

### Weer naar het periodiek systeem

Periodic table of the elements																			
period	group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	
1	1	H		Li	Be									He					
2	3	Na	Mg											B	C	N	O	F	
3	11	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Al	Si	P	S	Ne	
4	19	20	21		41	42	43	44	45	46	47	48	49	Ga	Ge	As	Se	Ar	
5	37	38	39	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	51	52	53	54
6	55	56	57		72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
7	Cs	Ba	La		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
	Fr	Ra	Ac		Rf	Dy	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
lanthanoid series																			
6	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71					
actinoid series	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103					
7	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr					

\*Numbering system adopted by the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). © Encyclopædia Britannica, Inc.

### Organisatie van elementen

- Atoomgetal  $Z = \#$  protonen in kern
- Massagetal  $A = \#$  nucleonen

Atoomsymbool:  ${}^A_Z X$  of  ${}^A X$

### Isotopen

Zelfde atoomgetal, verschillend massagetal

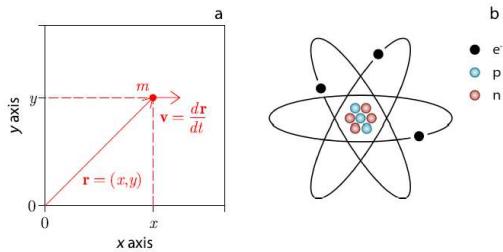


8

## Intermezzo – deeltjes, krachten en velden

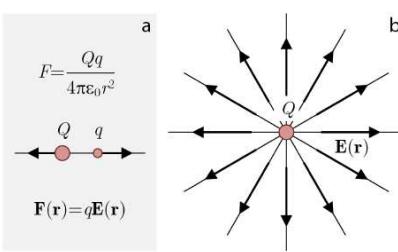
Mechanica - deeltjes hebben

- Eenduidige positie (gelokaliseerd)
- Massa



Mechanica – deeltjes interageren via

- Krachten
- Voorgesteld door velden



Planetair model van Rutherford past integraal in dit deeltjesperspectief

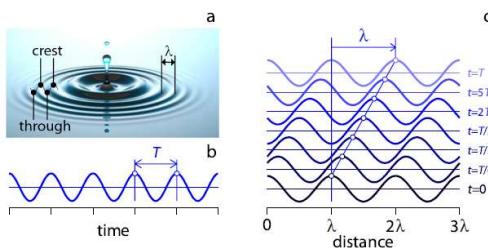


9

## Intermezzo – golven

Golven zijn bewegingstoestand

- Geen unieke positie (gedelokaliseerd)
- Geen massa



Maar wel gekarakteriseerd door

- Golflengte ( $\lambda$ )
- Frequentie ( $\nu$ )
- Snelheid ( $c$ )

$$\lambda\nu = c$$

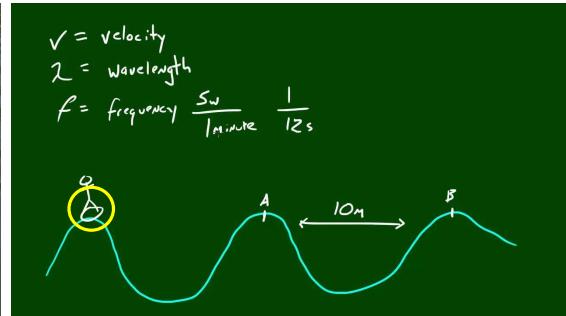
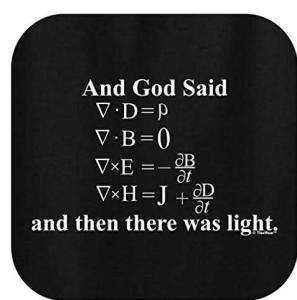
Stap van materiële golven  
Naar golven van krachtvelden



10

## Licht | theorie van Maxwell

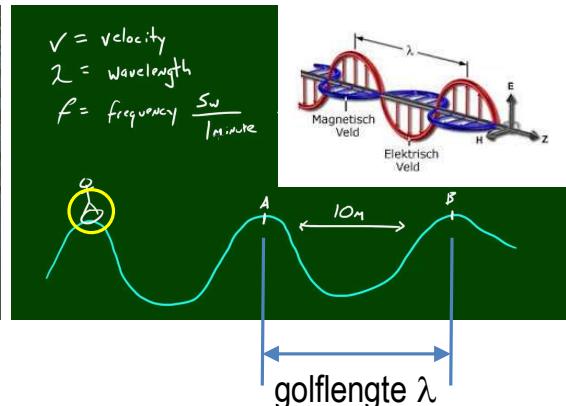
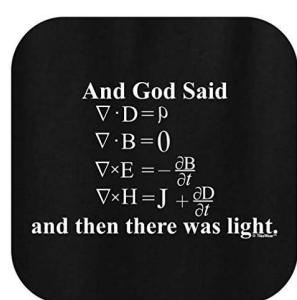
- Beschrijving van licht als elektromagnetische golf



11

## Licht | theorie van Maxwell

- Beschrijving van licht als elektromagnetische golf



Nobelprijs  
1901

Nobelprijs  
1902

Nobelprijs  
1903

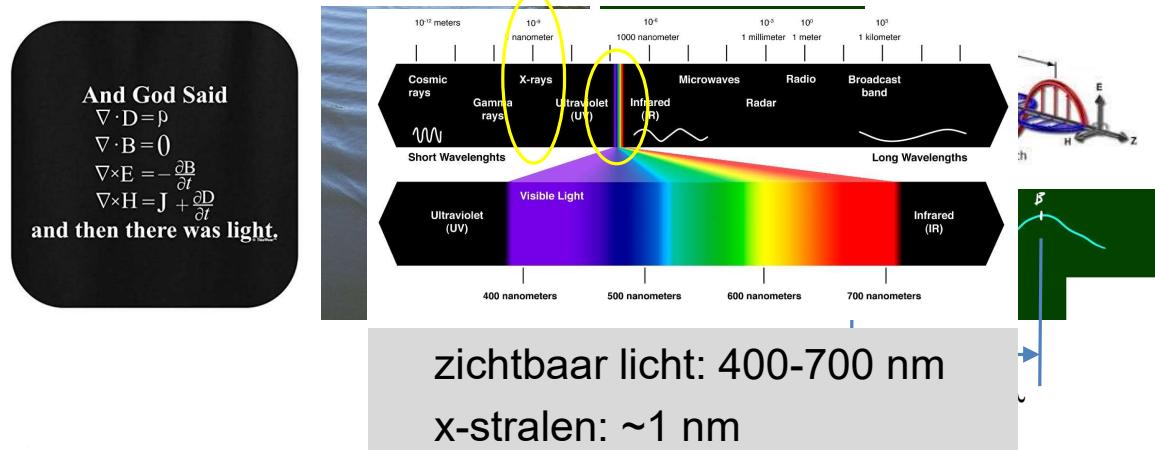
Nobelprijs  
1909

Nobelprijs  
1936

12

## Licht | theorie van Maxwell

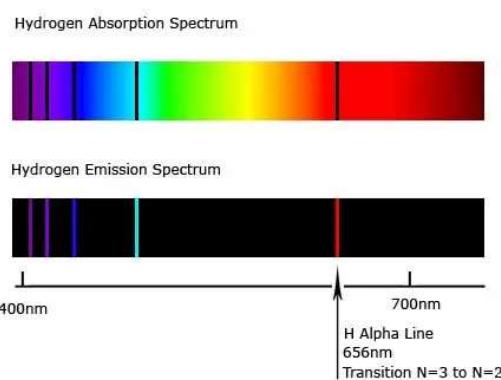
- Beschrijving van licht als elektromagnetische golf



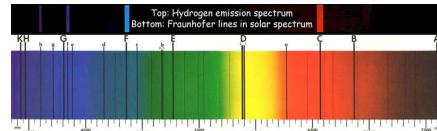
13

## Atomaire eigenschappen

### Atomaire absorptie en emissiespectra



- Waterstof straalt licht uit met specifieke golflengten (kleur)
- Waterstof absorbeert licht met dezelfde golflengte (kleur)



De zon bevat waterstof!



14

## Licht | kwantumtheorie

Licht wisselt energie uit in vaste gehelen (*deeltjes*)

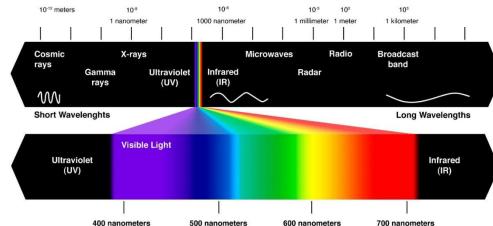
Golflengte bepaalt fotonenergie

$$\text{Energie } E = \frac{hc}{\lambda} = h\nu$$

golflengte      constante van Planck      frequentie

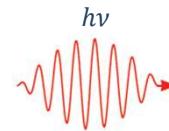
bij 620 nm (rood licht)

$$E = \frac{6.68 \cdot 10^{-34} \times 3 \cdot 10^8}{620 \cdot 10^{-9}} = 3.2 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 2.0 \text{ eV}$$



### Foton – individueel lichtdeeltje

Voorstelling foton



15

## Licht | atomaire energieschaal

Atomaire energie tellen

- Energie van 1 rood-licht foton?

$$E \approx 3.2 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

- Joule of Calorie niet handig



elektronvolt  
energie die 1 elektron wint wanneer het spanning van 1 Volt doorloopt

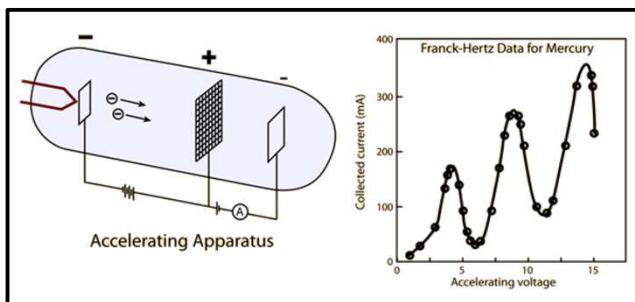


rood-licht foton  
 $E \approx 2 \text{ eV}$

16

## Atomaire eigenschappen

### Het experiment van Franck en Hertz



- Vaststelling
1. Bij veelvouden van 4.9 V versnelfspanning valt stroom op nul terug
  2. Bij 4.9 V begint kwik emissie
  3.  $4.9 \text{ eV} \sim 254 \text{ nm}$

- Elektronen versneld/afgeremd in kwik damp
- Kwik – karakteristieke spectraallijn bij 254 nm

Energie die 1 elektron verliest  
omgezet in energie van 1 foton



Zie ook achtergrond op Ufora

17

## Atomaire eigenschappen

### Samengevat

- Atomaire energie wijzigt met discrete hoeveelheden
  - Door absorptie van licht (energieverhoging)
  - Door botsing met elektronen (energieverhoging)
  - Door emissie van licht (energieverlaging)
- Energiebedragen consistent met idee 1 foton per overgang

- Atomen komen voor in discrete toestanden, gekenmerkt door vaste energie  
➢ Verandering van toestand  $\sim$  vast energieverlies tussen begin- en eindtoestand



18

## Deeltjes zijn golven zijn deeltjes

- Kwantummechanica bepaalt wereld op nanometerschaal

golf	deeltje
	
beweging	massa
niet-lokaal	vaste plaats



Zie ook achtergrond op Ufora

19

## Deeltjes zijn golven zijn deeltjes

Atomaire bouwstenen zijn zowel deeltje als golf

golf	deeltje
	
beweging	massa
niet-lokaal	vaste plaats



20

## Deeltjes zijn golven zijn deeltjes

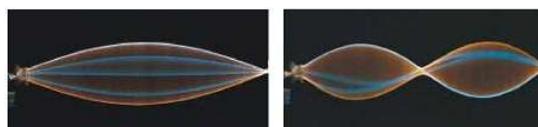
- Atomaire bouwstenen zijn zowel deeltje als golf



21

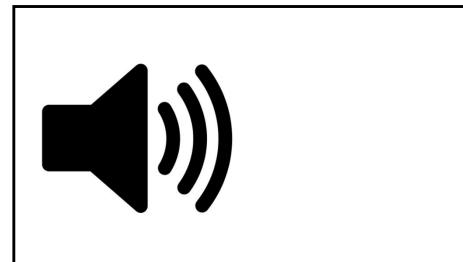
## Deeltjes zijn golven zijn deeltjes

- Golven lokaliseren geeft staande golven



*golf-deeltje relatie*

$$p = \frac{h}{\lambda} \text{ (de Broglie)}$$

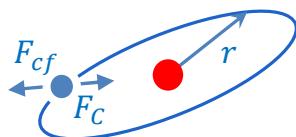


22

## Atomaire eigenschappen

### Het elektron als golf-in-een-doos

#### Planetair beeld H-atoom



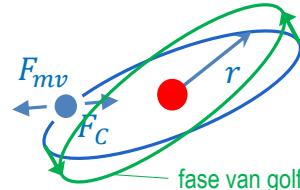
$$F_{cf} = F_C$$

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$E = E_{kin} + E_{pot}$$

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

#### Staande elektrongolf



$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{mv}$$



23

## Atomaire eigenschappen

### Het elektron als golf-in-een-doos

#### Energie van elektrontoestand

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

Discrete toestanden gekenmerkt door *kwantumgetal n*

#### Getalmatig

- $E_1 = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = 13.6 \text{ eV}$  (Rydberg, Ry)
- $\Delta E_{n \rightarrow m} = \text{Ry} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$

$n \rightarrow m$	$\Delta E_{n \rightarrow m}$ (eV)	$\lambda$ (nm)
$2 \rightarrow 3$	1.89	656
$2 \rightarrow 4$	2.55	486
$2 \rightarrow 5$	2.86	434
$2 \rightarrow 6$	3.02	410



24

## Atomaire eigenschappen

### Het elektron als golf-in-een-doos

#### Energie van elektrontoestand

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

Discrete toestanden gekenmerkt door *kwantumgetal n*

#### Getalmatig

- Correcte identificatie Balmer reeks
- Voorspelling van andere reeksen in UV en infrarood

$n \rightarrow m$	$\Delta E_{n \rightarrow m}$ (eV)	$\lambda$ (nm)
$2 \rightarrow 3$	1.89	656
$2 \rightarrow 4$	2.55	486
$2 \rightarrow 5$	2.86	434
$2 \rightarrow 6$	3.02	410



25

## Atomaire eigenschappen

### Het elektron als golf-in-een-doos

#### Energie van elektrontoestand

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

Discrete toestanden gekenmerkt door *kwantumgetal n*

#### Getalmatig

$$\bullet \quad a_B = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 0.05 \text{ nm (Bohrstraal)}$$

Karakteristieke straal H-atoom

$n \rightarrow m$	$\Delta E_{n \rightarrow m}$ (eV)	$\lambda$ (nm)
$2 \rightarrow 3$	1.89	656
$2 \rightarrow 4$	2.55	486
$2 \rightarrow 5$	2.86	434
$2 \rightarrow 6$	3.02	410



26