

Chemische structuren

Atomen - Inleiding

prof. Zeger Hens | zeger.hens@ugent.be | www.nano.ugent.be

1

Atoombouw en atomaire systematiek

Historische basis

- Klassieke oudheid (5^e 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 \neq atoom

2

2

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 éénduidig 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

Atomaire systematiek

Het periodiek systeem (de tabel van Mendeleev)

Organisatie van elementen

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

Tabelle II.

Reihen	Gruppe I. R ⁰	Gruppe II. R ⁰	Gruppe III. R ⁰	Gruppe IV. R ⁰	Gruppe V. R ⁰	Gruppe VI. R ⁰	Gruppe VII. R ⁰	Gruppe VIII. R ⁰
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=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	—=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	Cs=133	Ba=137	Di=138	Ce=140	—	—	—	—
9	(—)	—	—	—	—	—	—	—
10	—	—	Er=178	La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=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

Atomaire systematiek

Het periodiek systeem (de tabel van Mendeleev)

Periodic table of the elements

group 1* 2

period

1 H 2 He

2 Li Be

3 Na Mg

4 K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr

5 Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe

6 Cs Ba La Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn

7 Fr Ra Ac Rf Db Sg Bh Hs Mt Ds Rg Cn Nh Fl Mc Lv Ts Og

lanthanoid series 6

actinoid series 7

Alkali metals

Alkaline-earth metals

Transition metals

Other metals

Other nonmetals

Halogens

Noble gases

Rare-earth elements (21, 39, 57–71) and lanthanoid elements (57–71 only)

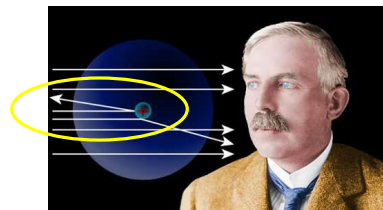
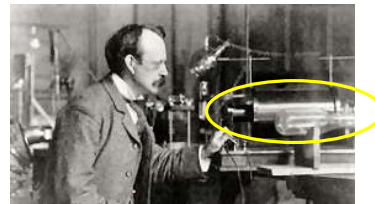
Actinoid elements

18

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

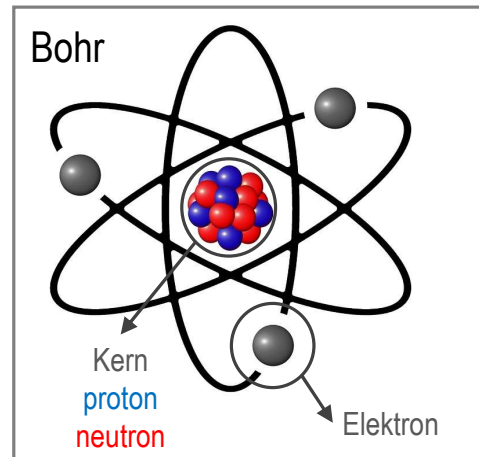
Atomaire structuur

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



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

lanthanoid series 6

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

actinoid series 7

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	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

Atoomsymbol: A_ZX of AX

Isotopen

Zelfde atoomgetal, verschillend massagetal

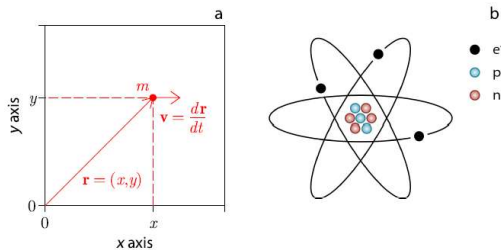
8

8

Intermezzo – deeltjes, krachten en velden

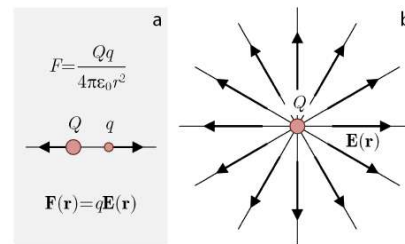
Mechanica - deeltjes hebben

- Eénduidige positie (gelokaliseerd)
- Massa



Mechanica – deeltjes interageren via

- Krachten
- Voorgesteld door velden

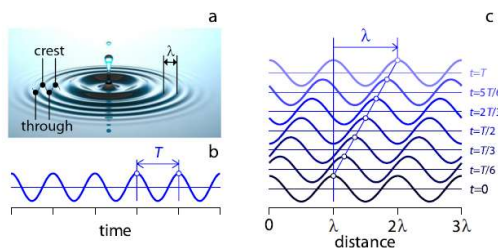


Planetair model van Rutherford past integraal in dit deeltjesperspectief

Intermezzo – golven

Golven zijn bewegingstoestand

- Geen unieke positie (gedelokaliseerd)
- Geen massa



Maar wel gekarakteriseerd door

- Golflengte (λ)
- Frequentie (ν)
- Snelheid (c)

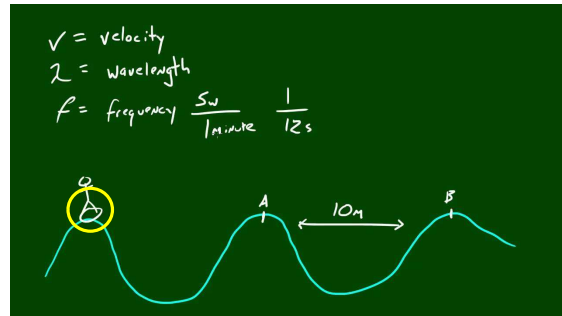
$$\lambda \nu = c$$

Stap van materiële golven
Naar golven van krachtvelden

Licht | theorie van Maxwell

- Beschrijving van licht als elektromagnetische golf

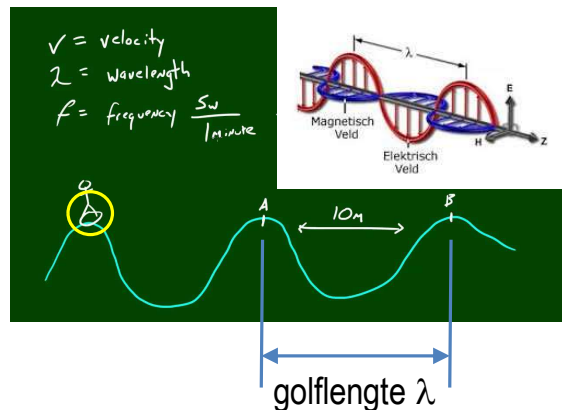
And God Said
 $\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$
 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$
 $\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$
 $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$
 and then there was light.



Licht | theorie van Maxwell

- Beschrijving van licht als elektromagnetische golf

And God Said
 $\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$
 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$
 $\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$
 $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$
 and then there was light.



**Nobelprijs
1901**

**Nobelprijs
1902**

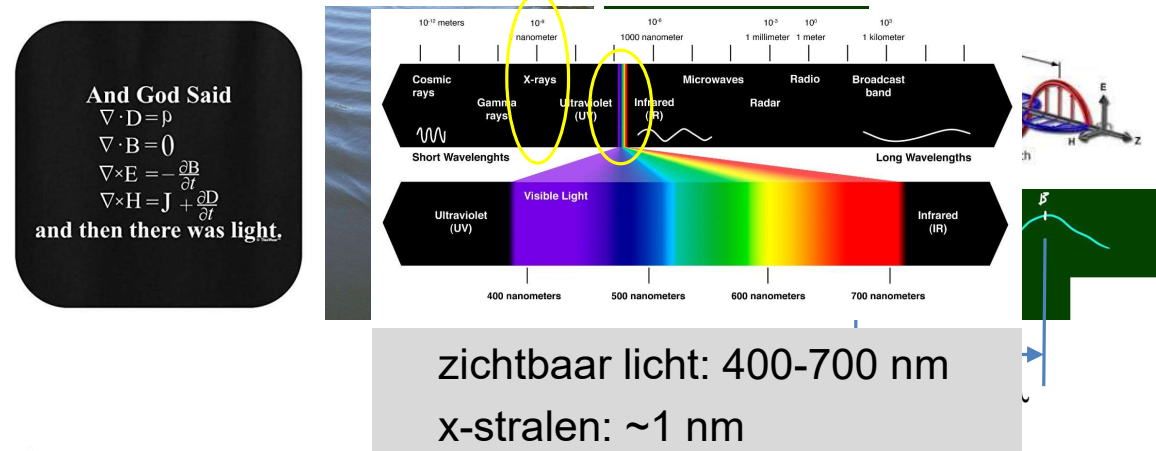
**Nobelprijs
1903**

**Nobelprijs
1909**

**Nobelprijs
1936**

Licht | theorie van Maxwell

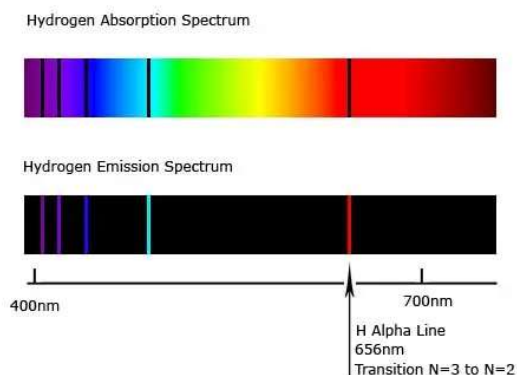
– Beschrijving van licht als elektromagnetische golf



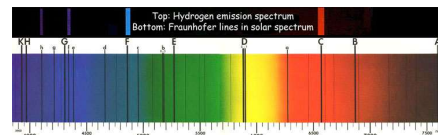
13

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*)

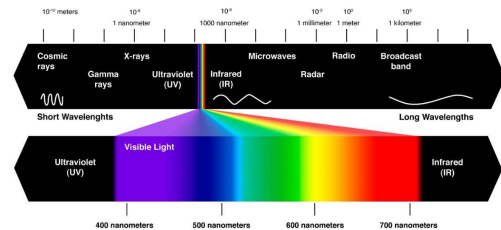
Golflengte bepaalt fotonenergie

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

golflengte constante van Planck frequentie

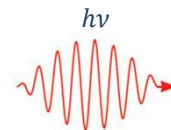
bij 620 nm (rood licht)

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



Foton – individueel lichtdeeltje

Voorstelling foton



15

Licht | atomaire energieschaal

Atomaire energie tellen

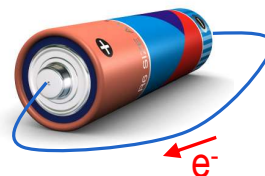
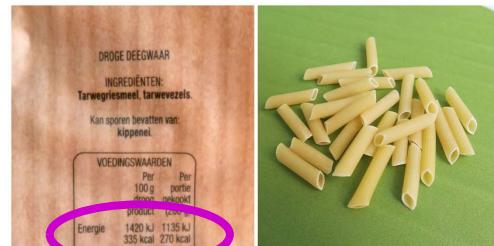
- Energie van 1 rood-licht foton?

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

- Joule of Calorie niet handig

elektronvolt

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



rood-licht foton

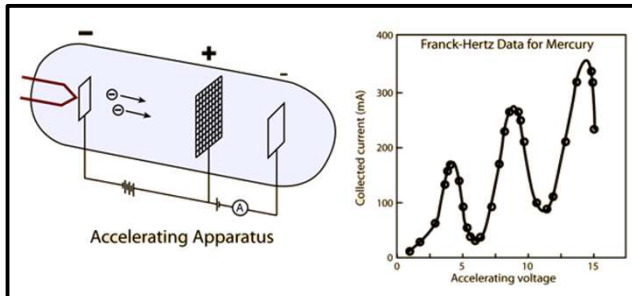
$$E \approx 2 \text{ eV}$$



16

Atomaire eigenschappen

Het experiment van Franck en Hertz



Vaststelling

1. Bij veelvouden van 4.9 V versnelspanning valt stroom op nul terug
2. Bij 4.9 V begint kwik emissie
3. 4.9 eV ~ 254 nm

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

Energie die 1 elektron verliest
omgezet in energie van 1 foton

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

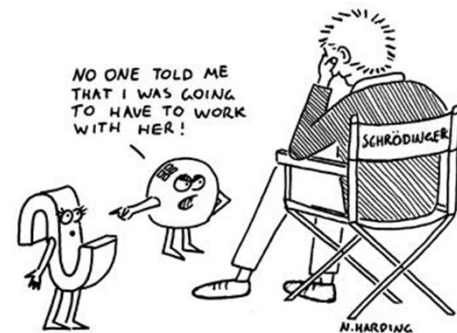
- Atomen komen voor in discrete toestanden, gekenmerkt door vaste energie
- Verandering van toestand ~ vast energieverval tussen begin- en eindtoestand

18

Deeltjes zijn golven zijn deeltjes


- Kwantummechanica bepaalt wereld op nanometerschaal

golf	deeltje
	
beweging	massa
niet-lokaal	vaste plaats

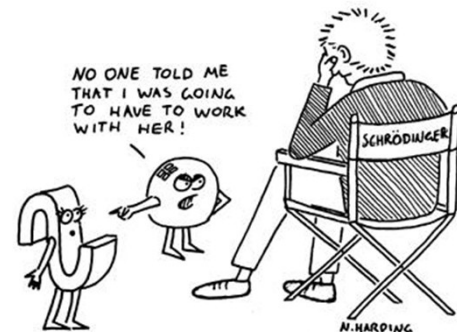


Deeltjes zijn golven zijn deeltjes

Atomaire bouwstenen zijn
zowel deeltje als golf

golf	deeltje
	
beweging	massa
niet-lokaal	vaste plaats

elektronenwolk



Deeltjes zijn golven zijn deeltjes

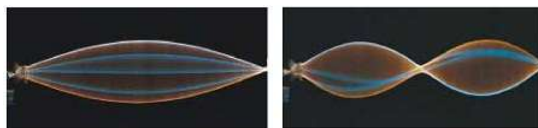
- Atomaire bouwstenen zijn zowel deeltje als golf



21

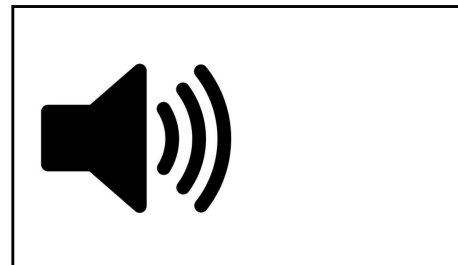
Deeltjes zijn golven zijn deeltjes

- Golven lokaliseren geeft staande golven



golf-deeltje relatie

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

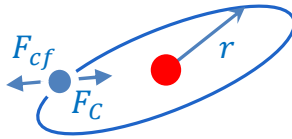


22

Atomaire eigenschappen

Het elektron als golf-in-een-doos

Planetair beeld H-atoom



$$F_{cf} = F_c$$

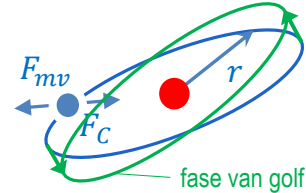
$$m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

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

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



Staande elektrongolf



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

23

Atomaire eigenschappen

Het elektron als golf-in-een-doos

Energie van elektrontoestand

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

Discrete toestanden gekenmerkt
door *kwantumgetal n*



Getalmatig

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

$n \rightarrow m$	$\Delta E_{n \rightarrow m} \text{ (eV)}$	$\lambda \text{ (nm)}$
$2 \rightarrow 3$	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)	λ (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

- $a_B = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 0.05 \text{ nm}$ (Bohrstraal)
- Karakteristieke straal H-atoom

$n \rightarrow m$	$\Delta E_{n \rightarrow m}$ (eV)	λ (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